

**SEPARACIÓN TERNARIA DE UNA MEZCLA AZEOTRÓPICA
ISOPROPANOL-AGUA**

**Erika Palacio González
Lorena María Tamayo Monsalve**

**ASESOR
Juan Sebastián Gómez, Ms**

**PROYECTO DE GRADO
UNIVERSIDAD EAFIT
2013**

**SEPARACIÓN TERNARIA DE UNA MEZCLA AZEOTRÓPICA
ISOPROPANOL-AGUA**

**ERIKA PALACIO GONZÁLEZ
LORENA MARÍA TAMAYO MONSALVE**

**Proyecto de grado para optar al
Título de Ingeniera de Procesos**

**ASESOR:
JUAN SEBASTIAN GÓMEZ, Ms**

**CO-ASESOR:
DIEGO ANDRÉS ACOSTA MAYA, PhD**

**UNIVERSIDAD EAFIT
ESCUELA DE INGENIERÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA DE PROCESOS
MEDELLÍN
2013**

Nota de aceptación:

Presidente del jurado

Jurado

Jurado

AGRADECIMIENTOS

A nuestro asesor JUAN SEBASTIÁN GÓMEZ y a la compañía Invesa S.A. por darnos la oportunidad de trabajar en esta investigación. Por brindarnos su apoyo y suministraron los solventes necesarios para este estudio.

A DIEGO ANDRÉS ACOSTA, coasesor de nuestro proyecto por transmitirnos sus conocimientos y por guiarnos tanto en el proyecto de grado como en el camino de formación profesional. Por su continuo acompañamiento y orientación en todos y cada uno de los pasos que fueron necesarios para llevar a cabo esta investigación. Además, por su constante disponibilidad, paciencia y atención.

A JUAN DAVID ORTEGA, Jefe del departamento de Ingeniería de Procesos, por su disponibilidad y gran ayuda en la simulación que incluía este proyecto.

Especial agradecimiento a NESTOR MAURICIO LONDOÑO, auxiliar de los laboratorios de Ingeniería de procesos, por adquirir un compromiso con nuestro proyecto, su ayuda continua y disponibilidad de servicio

A JHON JAIRO ESTRADA auxiliar de los laboratorios de Ingeniería de Procesos por su colaboración y facilitarnos materiales necesarios durante el desarrollo del proyecto.

EDGAR ARBELÁEZ, coordinador del laboratorio de química instrumental de Ingeniería de Procesos por su orientación y colaboración.

EDISON GIL PAVAS, docente de Ingeniería de procesos, por proporcionarnos el aislante para el procedimiento experimental.

TABLA DE CONTENIDO

RESUMEN	14
INTRODUCCIÓN	15
1. ESTADO DEL ARTE.....	4
RESUMEN	4
1.1. MARCO TEÓRICO	4
1.1.1. Equilibrio	4
1.1.1.1. Equilibrio líquido–vapor (ELV)	5
1.1.1.2. Equilibrio líquido-líquido (ELL).....	5
1.1.2. Mezclas ideales	6
1.1.3. Destilación.....	6
1.1.3.1. Destilación batch.....	7
1.1.3.2. Destilación continua.....	7
1.1.4. Destilación azeotrópica.....	8
1.1.4.1. Azeótropo	8
1.1.4.2. Azeótropo mínimo y azeótropo máximo	9
1.1.4.3. Agente de arrastre	9
1.1.4.4. Destilación azeotrópica homogénea	9
1.1.4.5. Destilación azeotrópica heterogénea	10
1.1.5. Destilación extractiva	10
1.1.6. Mapas de curvas residuales	11
1.1.7. Columna de destilación	11
1.1.8. Heurística para el diseño de equipos	12
1.1.9. Isopropanol	12
1.1.10. Antecedentes	13
1.2. OBJETIVOS	17
1.2.1. General.....	17
1.2.2. Específicos.....	17
1.3. ALCANCE	18
CONCLUSIONES	18
BIBLIOGRAFÍA	19
2. METODOLOGÍA	23
RESUMEN	23
2.1. METODOLOGÍA	23
2.1.1. Estudio de los diagramas ternarios	23

2.1.2. Elaboración de esquemas de separación	23
2.1.3. Selección de los agentes de arrastre	24
2.1.4. Simulación.....	24
2.1.5. Pruebas de laboratorio	25
2.1.6. Análisis de pureza.....	26
2.1.7. Comparación de resultados.....	26
2.1.8. Selección del agente arrastre apropiado.....	27
2.1.9. Entrega de informe	27
CONCLUSIONES	27
BIBLIOGRAFÍA	27
3. ESQUEMAS DE SEPARACIÓN.....	29
RESUMEN	29
3.1. EVALUACIÓN DE ESQUEMAS DE SEPARACIÓN.....	29
3.1.1. Grupo 1: Azeótropos ternarios y binarios con separación líquido-líquido	30
3.1.1.1. Separación con tolueno	30
3.1.1.2. Separación con etilacetato	34
3.1.1.3. Separación con ciclohexano.....	38
3.1.2. Grupo 2: Azeótropos binarios con separación líquido-líquido	42
3.1.2.1. Separación con ciclohexanona.....	42
3.1.2.2. Separación con n-butilacetato	46
3.1.2.3. Separación con isobutanol	50
3.1.2.4. Separación con o-xileno	53
3.1.2.5. Separación con n-butanol.....	57
3.1.3. Grupo 3: Azeótropo binario sin separación líquido-líquido	61
3.1.3.1. Separación con metanol.....	61
3.1.4. Grupo 4: Solventes sin límite de destilación, aptos para destilación extractiva....	64
3.1.4.1. Glicerol	64
3.1.4.2. Monoetilenglicol	67
3.1.4.3. Dietilenglicol	70
3.1.4.4. Metoxipropanolacetato	73
3.1.5. Grupo 5: Solventes no factibles.....	76
3.1.5.1. Etanol	76
3.1.5.2. Butil glicol éter.....	78
CONCLUSIONES	80
BIBLIOGRAFÍA	80
4. ANÁLISIS ECONÓMICO	81
RESUMEN	81
4.1. ANÁLISIS ECONÓMICO PRELIMINAR DE ALTERNATIVAS FACTIBLES.....	81

CONCLUSIONES	84
BIBLIOGRAFÍA	85
5. SIMULACIÓN.....	86
RESUMEN	86
5.1. SIMULACIÓN DEL PROCESO DE LAS ALTERNATIVAS FACTIBLES.....	86
5.1.1. Metanol.....	87
5.1.2. Ciclohexanona	90
5.1.3. Isobutanol.....	93
5.1.4. Monoetilenglicol	96
5.2. Solventes con una pureza inferior al 99.5%.....	99
CONCLUSIONES	108
BIBLIOGRAFÍA	108
6. PRUEBAS DE LABORATORIO Y RESULTADOS	109
RESUMEN	109
6.1. PRUEBAS DE LABORATORIO	109
6.1.1. Ciclohexanona.	110
6.1.2. Metanol.....	112
6.1.3. Monoetilenglicol	112
6.2. RESULTADOS.....	113
6.2.1. Densidad	113
6.2.2. Karl Fischer	115
CONCLUSIONES	117
BIBLIOGRAFÍA	118
7. ANÁLISIS DE RESULTADOS	119
RESUMEN	119
7.1. ANÁLISIS DE RESULTADOS	119
7.1.1. Análisis por costos.....	119
7.1.2. Análisis de pureza.....	120
CONCLUSIONES	122
BIBLIOGRAFÍA	123
8. SELECCIÓN DEL AGENTE DE ARRASTRE	124
RESUMEN	124

8.1. Selección del agente de arrastre	124
CONCLUSIONES	124
9. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	125
9.1. Conclusiones	125
9.2. Recomendaciones	126
Anexo A	128

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1.1. Algunos antecedentes de destilación azeotrópica.....	13
Tabla 1.2. Algunos antecedentes de destilación extractiva	15
Tabla 3.1. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–tolueno y verificación de factibilidad.	31
Tabla 3.2. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–etilacetato y verificación de factibilidad.	35
Tabla 3.3. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–ciclohexano y verificación de factibilidad.	39
Tabla 3.4. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–ciclohexanona y verificación de factibilidad.....	43
Tabla 3.5. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–n–butilacetato y verificación de factibilidad	47
Tabla 3.6. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–isobutanol y verificación de factibilidad.	51
Tabla 3.7. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–o–xileno y verificación de factibilidad.	54
Tabla 3.8. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–n–butanol y verificación de factibilidad.	58
Tabla 3.9. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–metanol y verificación de factibilidad	61
Tabla 3.10. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–glicerol y verificación de factibilidad	65
Tabla 3.11. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–monoetilenglicol y verificación de factibilidad.....	68
Tabla 3.12. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–dietilenglicol y verificación de factibilidad.	71
Tabla 3.13. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–metoxipropanolacetato y verificación de factibilidad.	74
Tabla 3.14. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–etanol y verificación de factibilidad	77
Tabla 3.15. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–butil glicol éter y verificación de factibilidad.	79
Tabla 4.1. Costos totales para cada alternativa propuesta con los diferentes solventes ...	82
Tabla 4.2. Consideraciones ambientales de cada uno de los solventes	82
Tabla 5.1. Flujo de IPA (Kmol/h) y fracción molar de IPA a partir de la simulación de las alternativas más factibles.....	86
Tabla 5.2. Tabla de corrientes para el sistema ternario isopropanol–agua–metanol	89
Tabla 5.3. Tabla de corrientes para el sistema ternario isopropanol–agua–ciclohexanona	92
Tabla 5.4. Tabla de corrientes para el sistema ternario isopropanol–agua–Isobutanol.....	95

Tabla 5.5. Tabla de corrientes para el sistema ternario isopropanol–agua–Monoetilenglicol	98
Tabla 5.6. Tabla de corrientes para el sistema ternario isopropanol–agua–o-xileno	101
Tabla 5.7. Tabla de corrientes para el sistema ternario isopropanol–agua–glicerol	103
Tabla 5.8. Tabla de corrientes para el sistema ternario isopropanol–agua–dietilenglicol	105
Tabla 5.9. Tabla de corrientes para el sistema ternario isopropanol–agua–metoxipropanolacetato	107
Tabla 6.1. Moles de IPA obtenidas con metanol a partir de la densidad	113
Tabla 6.2. Moles de IPA obtenidas con monoetilenglicol a partir de la densidad	114
Tabla 6.3. Moles de IPA obtenidas con ciclohexanona a partir de la densidad	115
Tabla 6.4. Porcentaje de agua obtenido con metanol a partir de Karl Fischer	115
Tabla 6.5. Porcentaje de agua obtenido con monoetilenglicol a partir de Karl Fischer ...	116
Tabla 6.6. Porcentaje de agua obtenido con ciclohexanona a partir de Karl Fischer	117
Tabla 7.1. Costos preliminares arrojados por los cálculos de la regla de la palanca en el camino de destilación	119
Tabla 7.2. Costos arrojados por la simulación (ASEI, 2013)	119
Tabla 7.3. Resultados de los análisis de pureza para el metanol	120
Tabla 7.4. Resultados de los análisis de pureza para el monoetilenglicol	121
Tabla 7.5. Resultados de los análisis de pureza para la ciclohexanona	121

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1. Diagramas de equilibrio del punto de ebullición: (a) azeótropo de temperatura máxima. (b) azeótropo de temperatura mínima (Geankoplis, 1993).	9
Figura 3.1. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol-agua-tolueno	31
Figura 3.2. Esquema de separación para el sistema ternario isopropanol-agua-tolueno	32
Figura 3.3. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol-agua-tolueno	33
Figura 3.4. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol-agua-etilacetato	34
Figura 3.5. Esquema de separación para el sistema ternario isopropanol-agua-etilacetato	36
Figura 3.6. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol-agua-etilacetato	37
Figura 3.7. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol-agua- ciclohexano.....	38
Figura 3.8. Esquema de separación para el sistema ternario isopropanol-agua- ciclohexano	40
Figura 3.9. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol-agua- ciclohexano	41
Figura 3.10. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol-agua- ciclohexanona	43
Figura 3.11. Esquema de separación para el sistema ternario isopropanol-agua- ciclohexanona	44
Figura 3.12. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol-agua- ciclohexanona	45
Figura 3.13. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol-agua-n-butilacetato	46
Figura 3.14. Esquema de separación para el sistema ternario isopropanol-agua-n-butilacetato.....	48
Figura 3.15. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol-agua-n-butilacetato	49
Figura 3.16. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol-agua-isobutanol	50
Figura 3.17. Esquema de separación para el sistema ternario isopropanol-agua- isobutanol	51
Figura 3.18. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol-agua-isobutanol	52
Figura 3.19. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol-agua-o-xileno	53
Figura 3.20. Esquema de separación para el sistema ternario isopropanol-agua-o-xileno	55
Figura 3.21. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol-agua-o-xileno	56
Figura 3.22. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol-agua-n-butanol.....	58
Figura 3.23. Esquema de separación para el sistema ternario isopropanol-agua-n-butanol	59
Figura 3.24. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol-agua-n-butanol	60

Figura 3.25. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–metanol.....	62
Figura 3.26. Esquema de separación para el sistema ternario isopropanol–agua–metanol	62
Figura 3.27. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua–metanol...	63
Figura 3.28. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–glicerol	64
Figura 3.29. Diagrama ternario para el sistema ternario isopropanol–agua–glicerol.....	65
Figura 3.30. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua–glicerol	66
Figura 3.31. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua– monoetilenglicol	67
Figura 3.32. Diagrama ternario para el sistema ternario isopropanol–agua– monoetilenglicol	68
Figura 3.33. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua– monoetilenglicol	69
Figura 3.34. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–dietilenglicol.	70
Figura 3.35. Diagrama ternario para el sistema ternario isopropanol–agua–dietilenglicol	71
Figura 3.36. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua–dietilenglicol	72
Figura 3.37. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua– metoxipropanolacetato	73
Figura 3.38. Diagrama ternario para el sistema ternario isopropanol–agua– metoxipropanolacetato	74
Figura 3.39. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua– metoxipropanolacetato	75
Figura 3.40. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–etanol	76
Figura 3.41. Diagrama ternario para el sistema ternario isopropanol–agua–etanol	77
Figura 3.42. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–butil glicol éter	78
Figura 3.43. Diagrama ternario para el sistema ternario isopropanol–agua–butil glicol éter	79
Figura 5.1. Esquema de la simulación para el sistema ternario isopropanol–agua–metanol	88
Figura 5.2. Esquema de la simulación para el sistema ternario isopropanol–agua– ciclohexanona	91
Figura 5.3. Esquema de la simulación para el sistema ternario isopropanol–agua– isobutanol	94
Figura 5.4. Esquema de la simulación para el sistema ternario isopropanol–agua– monoetilenglicol	97
Figura 5.5. Esquema de la simulación para el sistema ternario isopropanol–agua–o-xileno	100
Figura 5.6. Esquema de la simulación para el sistema ternario isopropanol–agua–glicerol	102

Figura 5.7. Esquema de la simulación para el sistema ternario isopropanol–agua– dietilenglicol.....	104
Figura 5.8. Esquema de la simulación para el sistema ternario isopropanol–agua– metoxipropanolacetato.....	106
Figura 6.1. Montaje de la torre de destilación en vidriería	110
Figura 6.2. Separación de fases a partir de la segunda destilación.....	112

RESUMEN

Este proyecto de grado está compuesto por nueve capítulos. El primero corresponde a la teoría, marco teórico y algunos antecedentes relacionados con el trabajo, adicionalmente, se presentan los objetivos y la justificación del por qué se realizó el estudio. En el segundo capítulo se presenta la metodología utilizada en el desarrollo del proyecto. El tercer capítulo contiene la evaluación de los esquemas de separación de cada uno de los solventes proporcionados por la empresa Invesa S.A. clasificados por grupos de acuerdo a la forma de estos esquemas. En el cuarto capítulo se realizó un análisis económico preliminar de las alternativas más factibles, según los datos obtenidos mediante los cálculos de la regla de la palanca, tomando como referencia el costo de la alternativa de tratamiento de la mezcla azeotrópica IPA-agua empleada actualmente por la empresa Invesa S.A. También se evalúan las consideraciones ambientales de todos los grupos de agentes de arrastre. El quinto capítulo contiene los reportes obtenidos para la simulación de las alternativas más viables económicamente, con su respectivo análisis. En el sexto capítulo se describe detalladamente las condiciones de operación para las pruebas de laboratorio con los tres agentes seleccionados además contiene los análisis de pureza por densidad y prueba de Karl Fischer con cada uno de los solventes. El capítulo séptimo contiene una comparación entre los costos obtenidos por la simulación y los reportados por la regla de la palanca; también se realizó un análisis entre los métodos empleados para determinar la pureza con cada uno de los solventes. En el octavo capítulo se selecciona el mejor agente para poder llevar a cabo la separación de la mezcla azeotrópica y en el noveno capítulo se presentan las conclusiones y recomendaciones para la empresa Invesa S.A.

El proyecto consistió en seleccionar el solvente más apropiado para separar una mezcla de IPA - agua, para emplearlo en la empresa Invesa S.A., por lo tanto a lo largo de la elaboración de este se van eliminando agentes que no son viables para poder llevar a cabo la esta separación; hasta el punto en que los solventes se reducen solo a uno, para este caso la ciclohexanona fue la sustancia que presentó mejores resultados en cada etapa del informe; principalmente en los capítulos de simulación y de comparación de resultados de la pureza.

Palabras Claves: Mezcla azeotrópica, destilación, destilación extractiva, Isopropanol, agua, agentes.

INTRODUCCIÓN

Una mezcla azeotrópica es aquella que presenta uno o más azeótropos y en donde no es posible separar sus componentes por medio de una destilación simple (Ball, 2002). Un azeótropo existe cuando la composición en la fase líquida resulta ser la misma que en la fase de vapor, presentándose una limitación en la separación que se quiere lograr. Si no hay diferencia de composiciones entre la fase líquida y la fase vapor, las composiciones no pueden cambiar entre plato y plato, de modo que no puede haber separación de ahí en adelante (Céspedes and Ravagnani, 1995). Para lograr la separación, es necesario modificar las condiciones de operación de la columna de destilación o emplear un agente de separación, que modifica la volatilidad relativa de los componentes o forma un azeótropo con uno de los componentes de la mezcla. El azeótropo que se forma puede romperse después con diversos procedimientos (López, 1998) como destilación azeotrópica homogénea o heterogénea, destilación extractiva o destilación reactiva. La destilación azeotrópica por cambios de presión causa el desplazamiento del azeótropo modificando suficientemente la presión para romperlo o bien alejarlo de la región en la que se desea llevar a cabo la separación. Si el azeótropo no es suficientemente sensible a cambios de presión, se debe recurrir a las técnicas anteriormente mencionadas que emplean un tercer componente (Gabaldón *et al.*, 1999). Otro método existente para separación de mezclas azeotrópicas es por medio del uso de sales orgánicas e inorgánicas, donde uno o más de los componentes de la mezcla forman complejos de asociación con la sal, disminuyendo su actividad con relación a la del otro componente. De este modo, la presencia de una sal en la fase líquida altera sustancialmente la composición de equilibrio de la fase vapor con la ventaja de que, al contrario de un agente líquido de separación, esta fase se encuentra totalmente libre de sal (Céspedes and Ravagnani, 1995).

El isopropanol, más conocido como IPA, sigla proveniente de su nombre en inglés "Isopropyl alcohol" es ampliamente utilizado a nivel industrial para la fabricación de ésteres y como disolvente. Es un importante solvente orgánico usado para la producción comercial de acetona a través del proceso de deshidrogenación catalítica. Es también utilizado en la producción de peróxido de hidrógeno, como agente anticongelante en la gasolina y como solvente extractor en el proceso de concentración de proteína de pescado. La capacidad de producción global del IPA alcanzó los 2,153 mil toneladas métricas (4,747 millones de libras) en el 2003,

aunque el uso de la capacidad global era de apenas 80%. Aproximadamente el 74% de la capacidad total de producción está en EEUU, Europa occidental y Japón (DOW Company, 2006).

Este trabajo fue encaminado hacia la separación de una mezcla azeotrópica de IPA y agua, la cual se genera como subproducto de procesos de polimerización. Con este proyecto se deseaba obtener una pureza mayor a la azeotrópica (67.42% molar) por moles de IPA y así ser utilizado posteriormente en otros lotes, con el fin de disminuir los costos de materias primas, obtener productos de calidad y minimizar los residuos generados para reducir la contaminación ambiental.

1. ESTADO DEL ARTE

RESUMEN

En este capítulo se presentan los conceptos del proceso de separación destilación de los cuales se hará uso durante el desarrollo de este proyecto. La mezcla a separar se compone de isopropanol y agua y por el azeótropo que se forma entre ellos es necesario emplear un método de separación avanzado, llamado destilación azeotrópica, que involucra la adición de un tercer compuesto. Se incluyen conceptos de equilibrio y curvas residuales, por ser necesarios para conocer y analizar el comportamiento de la mezcla ante la adición de la tercera sustancia. Además, se muestran algunos antecedentes relacionados con el estudio, los cuales sirvieron de información para la realización del proyecto. Y por último, se presentan los objetivos y el alcance, seguido de las conclusiones relacionadas a lo planteado en este capítulo.

1.1. MARCO TEÓRICO

1.1.1. Equilibrio

El equilibrio es una condición estática en la cual no ocurren cambios con respecto al tiempo en las propiedades macroscópicas de un sistema. Esto implica un equilibrio de todos los potenciales que pueden causar algún cambio. Si un sistema que contiene cantidades fijas de especies químicas y que consiste en fases líquida y de vapor, en contacto íntimo, está aislado completamente, entonces con el tiempo no hay ninguna tendencia para que ocurra algún cambio dentro del sistema. La temperatura, la presión y la composición de las fases alcanzan valores finales en los cuales permanecen fijas por ende el sistema está en equilibrio. A pesar de ello, a nivel microscópico, las condiciones no son estáticas. Las moléculas que corresponden a una fase en un instante dado no son las mismas moléculas en esa fase un tiempo después. Las moléculas con velocidades suficientemente elevadas, que están cerca del límite entre las fases, superan las fuerzas de la superficie y pasan a la otra fase. (Smith *et al.*, 2005).

1.1.1.1. Equilibrio líquido–vapor (ELV)

El equilibrio líquido-vapor es referido a los sistemas donde una sola fase líquida está en equilibrio con su vapor (Smith *et al.*, 2005).

A presiones y temperaturas bajas y moderadas lejanas del punto crítico, el equilibrio de la fase líquido-vapor para una mezcla multicomponente está dado por:

$$y_i * P = x_i * \gamma_i(T, x) * P_i^{Sat}(T) \quad i = 1, 2 \dots n \quad (1)$$

Dónde:

x_i, y_i = Composición del líquido y el vapor del componente i

P, T = Presión y temperatura del sistema

P_i^{Sat} = Presión de saturación del componente i

γ_i = Coeficiente de actividad del componente i en la fase líquida

Para mezclas ideales el coeficiente de actividad es igual a 1 y cuando son menores o mayores que 1, presentan desviaciones ya sea positiva o negativa de la ley de Raoult-Dalton. Si estas desviaciones son tan grandes que la presión de vapor o la temperatura de ebullición presentan un punto extremo a temperatura constante o a presión constante respectivamente, la mezcla es azeotrópica (Hilmen, 2000).

1.1.1.2. Equilibrio líquido-líquido (ELL)

El estudio del equilibrio líquido-líquido es la base para operaciones, tal como la extracción líquido-líquido, en la cual las dos fases que se encuentran son químicamente muy diferentes lo que conduce a una separación de los componentes de acuerdo con sus propiedades físicas y químicas. La extracción líquido-líquido es un proceso importante en la industria química que depende de las propiedades físicas y químicas de un disolvente para efectuar la separación de mezclas complejas de líquidos, tal como en la recuperación de productos valiosos y la eliminación de contaminantes en efluentes. (Robles *et al.*, 2010).

Los datos de equilibrio líquido-líquido son esenciales para una correcta comprensión de los procesos. El análisis de la composición de las 2 fases en equilibrio suministra información considerable sobre el balance de masa y los cálculos de transferencia de masa en el diseño y la optimización de los procesos de separación (Robles *et al.*, 2009).

1.1.2. Mezclas ideales

Una mezcla ideal presenta las siguientes características (Treybal, 1988):

- Las fuerzas intermoleculares promedio de atracción y repulsión en la solución no cambian al mezclar los componentes.
- El volumen de la solución varía linealmente con la composición.
- No hay absorción ni evolución de calor al mezclar los componentes. Sin embargo, en el caso de gases que se disuelven en líquidos, este criterio no incluye el calor de condensación del gas al estado líquido.
- La presión total de vapor de la solución varía linealmente con la composición expresada en fracción mol.

1.1.3. Destilación

La destilación es un proceso de separación en el que una mezcla de dos o más componentes, ya sea líquida o de vapor, es separada en sus componentes con una pureza deseada, mediante la adición o remoción de calor. (Cheremisinoff, 2000). Este proceso depende de las diferencias en los puntos de ebullición de cada uno de los componentes, en donde la fase vapor es más rica en los componentes más volátiles o de menor punto de ebullición que la fase líquida (Kiva *et al.*, 2003); también, depende de las concentraciones de los componentes presentes, donde la mezcla líquida tendrá diferentes características de puntos de ebullición. Esto significa que el proceso de destilación depende de las condiciones de presión de vapor en la mezcla líquida (Cheremisinoff, 2000).

Para conocer que tan fácil es una separación se calculan las volatilidades relativas de la mezcla. La volatilidad relativa de un componente i con respecto a un componente j es definida por la siguiente relación:

$$\alpha_{ij} = [y_i/x_i]/[y_j/x_j] \quad (2)$$

Donde y_i es la fracción molar del componente i en fase vapor, y x_i es la fracción molar del componente i en la fase líquida. Si la volatilidad relativa entre dos componentes es muy cercano a 1 significa que estos tienen características muy similares de presión de vapor y de punto de ebullición, por lo tanto la separación por destilación es difícil (Cheremisinoff, 2000).

1.1.3.1. Destilación batch

La destilación batch es una tecnología común de recuperación de disolventes empleada en las industrias químicas y farmacéuticas. Es recomendable cuando la cantidad de alimentación es pequeña y cuando se requieren productos de alta pureza. (Rodríguez *et al.*, 2005).

En estas operaciones discontinuas se carga la columna de destilación con una cantidad inicial de mezcla y durante la operación se van retirando una o más fases. En estas separaciones no se alcanza el estado estacionario y la composición de la carga inicial varía con el tiempo, dando lugar a un aumento de la temperatura del sistema y a una disminución de la cantidad relativa de los componentes de menor temperatura de ebullición en la mezcla inicial al avanzar la destilación (Henley and Seader, 1981).

1.1.3.2. Destilación continua

La destilación continua es un proceso ininterrumpido en el cual se verifica la producción de un flujo continuo. La mezcla que va a ser destilada puede ser introducida continuamente a la columna sin interrumpir la recogida del destilado. (Cheremisinoff, 2000).

Las columnas continuas se pueden clasificar de acuerdo con: la naturaleza del alimento (i.e., si es binaria o multicomponente), el número de corrientes de producto, si existe una alimentación adicional para ayudar con la separación (i.e., destilación extractiva o destilación azeotrópica), el tipo de los componentes en la columna (i.e., columna de platos o columna empacada) (Cheremisinoff, 2000).

1.1.4. Destilación azeotrópica

La destilación azeotrópica es definida como la destilación de los componentes que forman azeótropos. Generalmente se distinguen dos casos de destilación azeotrópica: *i*) donde la mezcla original a ser separada es una mezcla azeotrópica, y *ii*) donde se forma una mezcla azeotrópica deliberadamente por la adición de uno o más componentes formadores de azeótropos a la mezcla original. En el primer caso se debe encontrar un método para separar la mezcla azeotrópica y obtener las especificaciones y recuperación deseada del producto. En el segundo caso, además, es necesario seleccionar un componente que forme azeótropo (denominado “entrainer”), y sea efectivo para la separación deseada y fácilmente recuperado (Kiva *et al.*, 2003).

El primer paso para el diseño de una secuencia de destilación azeotrópica de mezclas binarias es la búsqueda de posibles agentes separadores a utilizar. Para ello, es necesario conocer el equilibrio líquido-vapor de las mezclas ternarias con el fin de predecir el intervalo de composiciones de los posibles productos de cabeza y cola. En este sentido, el análisis de los mapas de curvas residuales constituye una herramienta de gran utilidad para la determinación de la influencia del agente separador sobre la separación del azeótropo binario (Dongen and Doherty, 1985).

1.1.4.1. Azeótropo

Un azeótropo existe donde en algún punto del espacio de composición las composiciones en el equilibrio de la mezcla líquido-vapor son iguales para una presión y temperatura determinada, presentándose así una limitación en la separación que se quiere lograr, ya que si no hay diferencia de composiciones entre la fase líquida y la fase vapor, las composiciones no pueden cambiar entre plato y plato (Céspedes and Ravagnani, 1995). Normalmente se hace necesario modificar las condiciones de operación de la columna o emplear un agente de arrastre para lograr la separación de la mezcla (López, 1998).

La mezcla azeotrópica se separa por métodos especiales, tales como destilación azeotrópica homogénea o heterogénea, destilación extractiva, destilación reactiva o por cambios de presión donde es posible desplazar el azeótropo modificando suficientemente la presión para romperlo o bien alejarlo de la región en la que se desea llevar a cabo la separación (Gabaldón *et al.*, 1999).

1.1.4.2. Azeótropo mínimo y azeótropo máximo

Un azeótropo máximo, como se puede apreciar en la Figura 1.1 (a) del sistema acetona – cloroformo, se presenta cuando la temperatura máxima de equilibrio (T_{\max}) corresponde a una concentración X_{Az} (fracción molar de A en el azeótropo en la fase líquida) y en este punto $X_{Az} = Y_{Az}$ (fracción molar de A en el azeótropo en la fase Vapor). Por otra parte se presenta un azeótropo mínimo, como se muestra en la Figura 1.1 (b) cuando $Y_{Az} = X_{Az}$ a la temperatura de equilibrio mínima (Geankoplis, 1993).

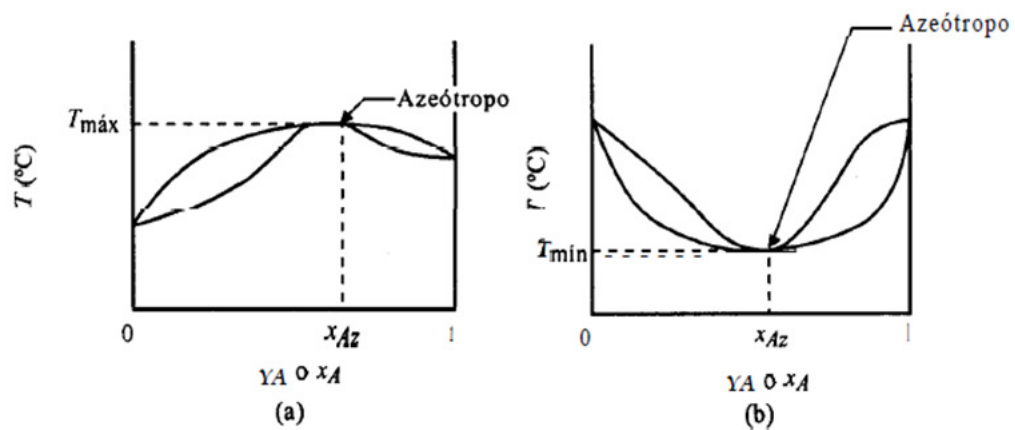


Figura 1.1. Diagramas de equilibrio del punto de ebullición: (a) azeótropo de temperatura máxima. (b) azeótropo de temperatura mínima (Geankoplis, 1993).

1.1.4.3. Agente de arrastre

El agente separador o agente de arrastre facilita la separación del azeótropo, ya sea debido a que provoca la aparición de un nuevo azeótropo de punto de ebullición extremo o bien por introducir cambios en las volatilidades relativas de los componentes originales. Dependiendo de la propiedad física que modifique el agente separador, éste se mezclará con la corriente de alimentación o se introducirá separadamente en la columna de rectificación.

1.1.4.4. Destilación azeotrópica homogénea

La destilación azeotrópica homogénea se da cuando no se presenta equilibrio líquido-líquido en la mezcla a separar o cuando el agente separador o de arrastre forma un azeótropo con alguno de los componentes originales. En la destilación

azeotrópica homogénea batch, la fase dividida no aparece en el líquido a lo largo de toda la columna. La destilación azeotrópica homogénea es menos empleada para separar los componentes con punto de ebullición cercano o azeótropos que la destilación azeotrópica heterogénea (Skouras *et al.*, 2005).

1.1.4.5. Destilación azeotrópica heterogénea

La destilación azeotrópica heterogénea se da cuando existe equilibrio líquido-líquido en la mezcla a separar, este tipo de destilación es ampliamente empleada para la deshidratación de un gran rango de sustancias. El agente de arrastre utilizado se concentra en la parte superior del vapor y cuando se condensa causa la formación de una segunda fase líquida que puede ser decantada y recirculada a la torre como un reflujo; esto debido a que los límites de destilación se pueden cruzar, ya que el agente de arrastre divide o separa la fase en regiones y por lo tanto las dos fases líquidas pueden caer en diferentes áreas de destilación. (Lei *et al.*, 2005). La otra fase líquida así como los fondos son los productos de la destilación. Esto es posible cuando el agente de arrastre forma un azeótropo heterogéneo con uno o más de los componentes en el alimento (Seider *et al.*, 2003).

Es un método eficiente para la separación de la mezclas azeotrópicas y de baja volatilidad relativa, sin embargo, el comportamiento dinámico y en estado estable es bastante complejo y difícil de controlar (Lang and Modla, 2006).

La destilación azeotrópica heterogénea requiere una pequeña cantidad de agente de arrastre si el azeótropo heterogéneo (Binario o ternario) es localizado en la misma región de destilación que el azeótropo binario a separar.

Comparando sistemas heterogéneos con homogéneos se observa mayor número de alternativas de separación en el caso heterogéneo. Además, el equilibrio líquido-líquido que se presenta, en ocasiones reduce el número destilaciones. (Rodríguez *et al.*, 2001).

1.1.5. Destilación extractiva

La destilación extractiva se usa para separar azeótropos y mezclas con puntos de ebullición cercanos. En la destilación extractiva se agrega un solvente a la columna de destilación. El solvente se selecciona para que uno de los componentes, **B**, pase a él en forma selectiva. Como se suele escoger al solvente

para que tenga un punto de ebullición apreciablemente mayor que el de los componentes que se están separando, el componente atraído, **B**, tiene volatilidad reducida. Entonces, el otro componente, **A**, se vuelve relativamente más volátil y es sencillo retirarlo en el destilado. Se requiere una columna aparte para separar al solvente y al componente **B** (Wankat, 2008).

1.1.6. Mapas de curvas residuales

Los mapas de curvas residuales sirven para obtener una mejor comprensión de mezclas azeotrópicas, para comparar entre diversos agentes de arrastre posibles en la separación de la mezcla y para proporcionar el diseño y las herramientas de síntesis de la destilación.

Una curva residual representa en un diagrama de composiciones la evolución con respecto al tiempo de la composición de las fases durante una destilación simple. “Un conjunto de curvas residuales configuran un mapa, que, por tanto puede estar referido a la fase líquida o a la fase vapor. La utilidad de los mapas de curvas residuales en el estudio de sistemas de separación se basa en la aparente similitud de los perfiles de composición de una columna y de la variación de composición del destilado.

Una propiedad de las curvas residuales son los puntos de arreglo, que son los vértices en el diagrama, ya sea el vértice de la sustancia pura o de los azeótropos formados. Cuando todas las curvas de residuo están direccionadas por una flecha hacia el punto de arreglo o vértice se da un nodo estable; cuando ninguna flecha está en dirección al punto de arreglo se da un nodo inestable y un punto de silla se genera cuando algunas curvas de residuo apuntan y otras no apuntan al punto de arreglo. Estos nodos determinan si es el sistema es topológicamente viable y si es posible realizar un camino de separación (Seider *et al.*, 2003).

1.1.7. Columna de destilación

Los distintos tipos de destilación se suelen llevar a cabo en las columnas de destilación. Son recipientes cilíndricos verticales con una entrada de alimentación por un punto dado de la columna y con una salida por la parte superior o cabeza para extraer los vapores a condensar, estos pueden volver en parte a la columna como reflujo a través de otra entrada por encima. Así mismo se dispone de una salida inferior ubicada en la base de la columna o cola para retirar la fracción no

vaporizada como producto de fondo; también pueden existir entradas o salidas laterales en diversos niveles de la columna. Además se requiere de un rehervidor, donde se transfiera calor al líquido del fondo de la columna para vaporizarlo parcialmente (Henley and Seader, 1981).

Existen una variedad de configuraciones para las columnas de destilación, cada una diseñada para un tipo específico de separación. Una forma simplificada de clasificación es observando cómo operan. De esta manera, se clasifican en columnas continuas y batch. En operación batch, el alimento a la columna es introducido por lotes, esto significa que la columna es alimentada con un lote y después se realiza el proceso de destilación y cuando este termina, se introduce otro lote. En contraste, las columnas de destilación continuas tienen una corriente de alimentación continua, no ocurren interrupciones a menos que exista algún problema con la columna (Cheremisinoff, 2000).

1.1.8. Heurística para el diseño de equipos

Para este estudio se empleó la heurística de Turton, para usar datos con los que no se cuentan de los equipos, tales como las torres de destilación, los platos de estas y los decantadores o tanques horizontales (Turton *et al.*, 2008).

1.1.9. Isopropanol

El isopropanol, más conocido como IPA, sigla proveniente de su nombre en inglés “Isopropyl alcohol” es ampliamente utilizado a nivel industrial para la fabricación de ésteres y como disolvente. Es un importante solvente orgánico usado para la producción comercial de acetona a través del proceso de deshidrogenación catalítica. Es también utilizado en la producción de peróxido de hidrógeno, como agente anticongelante en la gasolina y como solvente extractor en el proceso de concentración de proteína de pescado. La capacidad de producción global del IPA alcanzó los 2,153 mil toneladas métricas (4,747 millones de libras) en el 2003, aunque el uso de la capacidad global era de apenas 80%. Aproximadamente el 74% de la capacidad total de producción está en EEUU, Europa occidental y Japón (DOW Company, 2006).

1.1.10. Algunos antecedentes

Los antecedentes para destilación azeotrópica se muestran en la Tabla 1.1 y para destilación extractiva en la .

Tabla 1.1. Algunos antecedentes de destilación azeotrópica

Destilación azeotrópica		
Mezcla	Resultados	Fuente
IPA, agua y ciclohexano	Se construyó a escala de laboratorio, un montaje de destilación para encontrar el punto óptimo de la separación. El análisis mostro puntos óptimos de operación que podrían ser localizados en reflujos críticos. De esta manera se obtiene la pureza de IPA con mínimos consumos de energía y máximos productos de recuperación. Los puntos óptimos de operación estuvieron definidos a puntos cercanos a los 70 °C.	(Chien <i>et al.</i> , 1999)
Acetona-cloroformo-agua Etanol-agua-benceno IPA-agua-tolueno	Desarrollaron un algoritmo para la simulación de una columna de destilación azeotrópica heterogénea que no requiere previa especificación del número de etapas dentro de la región de la tercera fase. El algoritmo fue basado en la versión del algoritmo de Napthali-Sandholm, incluyendo también una subrutina estabilidad de fase y cálculo líquido-líquido con predicciones del modelo UNIFAC modificado. Los resultados para la mezcla acetona-cloroformo-agua concordaron excelentemente con estudios previos realizados, mientras que las predicciones para el sistema etanol-agua-benceno revelaron el gran efecto que el modelo termodinámico y los algoritmos tienen en la simulación de destilación de tres fases y para IPA-agua-tolueno las predicciones fueron hechas para un rango de condiciones pero no fue posible realizar comparaciones con estudios previos.	(Georgoula ki and Korchinsky, 1997)
IPA-agua-ciclohexano	Se investigaron las características de destilación azeotrópica heterogénea. Este análisis mostró puntos óptimos de operación para una columna de	(Wang <i>et al.</i> , 1998)

	destilación que podrían ser localizados en reflujos críticos. A un reflujo de 1,0 mol/min, la mayor pureza posible de IPA es 0,999. Sin embargo, para un reflujo a 0,78 mol/min, la mayor pureza posible de IPA es sólo 0,88. El reflujo crítico representa un estado operativo que alcanza la más alta pureza del IPA con un consumo mínimo de energía.	
IPA-agua-benceno	En este estudio, el modelado y la optimización se realizan por separado para obtener más del 99.9% en moles de IPA a partir de una corriente de IPA acuosa usando benceno como un agente de arrastre a través de un proceso de destilación azeotrópica, el cual consta de tres columnas de destilación. Esta investigación demostró que la concentración óptima de IPA en la parte superior de la columna que minimiza la carga térmica total de los rehervidores es 38.7% moles y el valor óptimo de la función objetivo es $1,1876 \times 10^6$ kcal/hr.	(Cho and Jeon, 2006)
IPA-agua-ciclohexano	Proporcionan estrategias de control de dos tipos de procesos para la obtención del IPA puro. En uno de los procesos donde la composición del agente de arrastre no es necesaria, se requiere un control en cascada de temperatura y composición, junto con un control de nivel PI en el decantador orgánico. En el otro tipo de proceso donde se requiere una pequeña cantidad de composición del agente de arrastre, se sugiere un sistema de control on-off de la composición del agente de arrastre usando una temperatura cerca a la del fondo de la columna como la variable controlada, junto con un controlador sencillo de temperatura en la columna.	(Wang <i>et al.</i> , 2008)
IPA-agua-ciclohexano	Realizaron el estudio de separación de IPA-agua con el empleo de ciclohexano y de dos columnas de destilación. Encontraron una estrategia de control que requiere dos controladores de circuito de temperatura en la primera columna y uno en la segunda columna, donde el punto de control cerca	(Chien <i>et al.</i> , 2004)

	de la parte superior de la columna azeotrópica (columna 1) necesita ser controlado por el rehovidor y el otro punto de control cerca del fondo de la columna 1 debe ser controlado por el flujo del reflujo orgánico. También el nivel de la fase orgánica en el decantador debe ser controlado por una corriente con un caudal muy pequeño en estado estacionario.	
--	---	--

Tabla 1.2. Algunos antecedentes de destilación extractiva

Destilación extractiva		
Mezcla	Resultados	Fuente
IPA-agua- mezcla de etilén glicol y potasio glicólico	Un nuevo método de separación de destilación convencional con destilación extractiva-reactiva se propone para la separación de IPA y agua, utilizando la mezcla de etilén glicol ($C_2H_6O_2$) y potasio glicólico ($C_2H_5O_2K$) como un agente de arrastre y empleando cuatro columnas, dos columnas de destilación y dos extractivas-reactivas. La concentración de la alimentación es cercana a la del punto azeotrópico (81,5% en peso de IPA y 18,5% en peso de agua), la relación de volumen alimentación/solvente es de 1:1, y las relaciones en peso de etilén glicol y el hidróxido de potasio en el solvente es de 4:1. Se obtuvo en la parte superior de la columna de destilación extractiva una concentración de más del 96% en peso de IPA.	(Zhigang et al., 2002)
IPA-agua- sulfóxido de dimetilo (DMSO)	Se ha investigado el diseño y control del proceso de separación de IPA-agua a través de destilación extractiva. Se propone una estrategia de control que consiste en un solo circuito de control en un plato de cada columna para mantener la pureza requerida de los dos productos. Se ha encontrado que el proceso a través de destilación extractiva es mucho más competitivo que el de destilación azeotrópica heterogénea. El costo total anual se reduce hasta en un 32,7%, utilizando el proceso a través de	(Arifin and Chien, 2008)

	destilación extractiva y el costo de vapor requerido se reduce en un 30,3%.	
IPA-agua-etilenglicol	Presentaron el control del proceso de separación de IPA-agua. Demostraron que al reducir la relación de reflujo, se produce un cambio en el perfil de temperatura y se genera un aumento en las impurezas del IPA, por tal motivo se sugiere poner controladores de temperatura en los platos de la columna con un minuto de tiempo muerto, los rangos de transmisión de temperaturas de 300 a 500 K, todos los controladores de nivel proporcionales con ganancias de 2, tiempo de retención para líquidos de 5 minutos con el 50% de la capacidad exceptuando la última columna donde es de 10 min. También encontraron que para obtener una buena separación se debe tener abundancia de solvente.	(Luyben, 2006)
IPA-agua.	Compararon la separación de 2-propanol (IPA) y agua por medio de un proceso híbrido que consistía en integrar pervaporación y permeación con vapor con destilación contra la destilación extractiva convencional. Encontrándose así, el mejor diseño que consiste en una destilación simple con purificación de la corriente azeotrópica del destilado por una unidad de membrana con membranas inorgánicas, lográndose un ahorro de consumo de energía de hasta el 85%, un ahorro de inversión y de operación de más del 40% comparado con la destilación convencional.	(Sommer and Melin, 2004)
IPA-agua-ciclohexano	Se presenta un estudio de diseño de una configuración de tres columnas de destilación azeotrópicas heterogénea para separar IPA, usando ciclohexano como el agente de arrastre. Una columna pre-concentradora y una columna de recuperación del agente de arrastre empleadas en trabajos anteriores, debido a las bajas relaciones de reflujo son reemplazadas por una secuencia de tres columnas de extracción Este esquema propuesto,	(Chang <i>et al.</i> , 2012)

	<p>ahorra más energía y es más rentable que otros sistemas en la literatura. Una pureza extremadamente alta (99,9999% en moles) del producto IPA, puede obtenerse en los fondos. Además, se desarrolló una estructura de control en toda la planta, se implementó un circuito de control de temperatura en un plato para cada una de las tres columnas, el cual regula el servicio de calor en los rehervidores.</p>	
--	--	--

1.2. OBJETIVOS

1.2.1. General

Evaluar la separación de la mezcla azeotrópica IPA-agua mediante destilación ternaria haciendo uso de un agente de arrastre para obtener una pureza por moles de IPA superior a la azeotrópica.

1.2.2. Específicos

- Seleccionar diversos agentes de arrastre idóneos termodinámicamente y técnico-económicamente en la separación de la mezcla azeotrópica IPA-agua.
- Simular la destilación ternaria con los diferentes agentes seleccionados para verificar la posibilidad de la separación de IPA-agua.
- Evaluar procesos de destilación a escala de laboratorio de la mezcla ternaria azeotrópica con los agentes de arrastre seleccionados.
- Comparar los resultados obtenidos a escala de laboratorio con lo alcanzado en la simulación de la mezcla ternaria azeotrópica.

1.3. ALCANCE

El objetivo de este proyecto es evaluar la separación de la mezcla azeotrópica IPA-agua, obteniendo IPA con una pureza superior a la azeotrópica.

Para lograr esto, primero se identificarán los agentes de arrastre más apropiados de la lista dada por la empresa Invesa S.A (Ver anexo A), teniendo en cuenta los resultados que se pueden alcanzar, sus propiedades termodinámicas, balances de materia y sus costos. Luego, se procederá a simular el proceso de destilación y posteriormente se realizará una destilación experimental a nivel de laboratorio, empleando los equipos disponibles en la universidad EAFIT, con el fin de corroborar los datos arrojados por la simulación, en cuanto a la pureza alcanzada en esta.

Al finalizar, se entregará el informe de proyecto de grado que contiene todo lo relacionado con esta investigación, incluyendo los diagramas de diseño, la simulación, los reportes de pruebas de laboratorio y las recomendaciones para la compañía Invesa S.A.

CONCLUSIONES

Teniendo en cuenta la información de este capítulo, para separar la mezcla azeotrópica IPA-agua se han realizado estudios de varios tipos de destilación, tales como: destilación azeotrópica homogénea y heterogénea, destilación extractiva y destilación con membranas; siendo esta última el proceso de menor consumo energético. También, se han realizado combinaciones de estas técnicas con el fin de obtener un alto porcentaje de pureza del IPA con un menor costo energético. Respecto a las separaciones que se han realizado no se han encontrado reportes para todas las sustancias a manejar en este estudio, como glicerol, n-butanol, mono etil acetato entre otras. Adicionalmente, se han implementado sistemas de control a los procesos de separación reportados con el fin de mejorar el proceso, principalmente controles de temperatura y de reflujo. En este trabajo se propone, trabajar con todas las sustancias proporcionadas por Invesa S.A realizando un estudio detallado con cada una de ellas para inicialmente observar su comportamiento con la mezcla de interés y determinar la posibilidad termodinámica, ambiental y económica de trabajo.

BIBLIOGRAFÍA

Arifin, Saiful., & Chien, I-Lung. (2008). Design and Control of an Isopropyl Alcohol Dehydration Process via Extractive Distillation Using Dimethyl Sulfoxide as an entrainer. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 47(3), 790–803. doi:10.1021/ie070996n

Ball, D. W. (2002). *Physical Chemistry* (1st Ed.). Brooks Cole.

Céspedes, Andrés. P., & Ravagnani, Sergio. P. (1995). Modelado y simulación del proceso de destilación extractiva salina de etanol. *Inf Tecnol*, 6(5), 17–20.

Chang, Wen-Teng, Huang, Chi-Tsung, & Cheng, Shueh-Hen. (2012). Design and Control of a Complete Azeotropic Distillation System Incorporating Stripping Columns for Isopropyl Alcohol Dehydration. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 51(7), 2997–3006. doi:10.1021/ie202021g

Cheremisinoff, N. P. (2000). *Handbook of chemical processing equipment*. Butterworth-Heinemann.

Chien, I. L., Wang, C. J., Wong, D. S. H., Lee, C. H., Cheng, S. H., Shih, R. F., Tsai, C. S. (1999). Experimental investigation of optimal conventional control strategy for a heterogeneous azeotropic distillation column. *Computers & Chemical Engineering*, 23, 249–252.

Chien, I-Lung, Zeng, Kai-Luen, & Chao, Huan-Yi. (2004). Design and Control of a Complete Heterogeneous Azeotropic Distillation Column System. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 43(9), 2160–2174. doi:10.1021/ie030406v

Cho, Jungho., & Jeon, Jong - Ki. (2006). Optimization study on the azeotropic distillation process for isopropyl alcohol dehydration. *Korean Journal Chemical Engineering*, 23(1), 1–7.

DOW Company. (2006, May 2). Product Safety Assessment DOW Isopropanol. DOW. Retrieved from <http://www.dow.com/productsafety/finder/iso.htm#ProdUses>

Fien, G., & Liu, Y. (1994). Heuristic Synthesis and Shortcut Design of Separation Processes Using Residue Curve Maps: A Review. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 33(11), 2505–2522. doi:10.1021/ie00035a001

Gabaldón, C., Marzal, P., & Monton, J. B. (1999). Separación del Sistema Binario Azeotrópico 1-Propanol + Agua. Análisis de Mapas de Curvas Residuales. *Inf. Tecnológica*, 10(4), 43–48.

Geankoplis, C.J. (1993). *Transport Processes and Unit Operations* (3 Sub. ed.). Prentice Hall PTR.

Georgoulaki, A., & Korchinsky, W. J. (1997). Simulation of heterogeneous azeotropic distillation An Improved Algorithm Using Modified UNIFAC Thermodynamic Predictions and the Napthali-Sandholm Matrix Method, 75, 101–115.

Henley, E. J., & Seader, J. D. (1981). *Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering*. John Wiley and Sons.

Hilmen, Eva. Katrine. (2000). Separation of azeotropic mixtures: tools for analysis and studies on batch distillation operation (Dissertation). Norwegian University of Science and Technology, Norwegian.

Kiva, V. N., Hilmen, E. K., & Skogestad, S. (2003). Azeotropic phase equilibrium diagrams: a survey. *Chemical Engineering Science*, 58(10), 1903–1953. doi:10.1016/S0009-2509(03)00018-6

Lang, P., & Modla, G. (2006). Generalized method for the determination of heterogeneous batch distillation regions. *Chemical Engineering Science*, 61(13), 4262–4270. doi:10.1016/j.ces.2006.02.004

Lei, Z., Chen, B., & Ding, Z. (2005). *Special Distillation Processes* (1st ed.). Netherlands: Elsevier.

López, J.C. (1998). *Curso de ingeniería química: introducción a los procesos, las operaciones unitarias y los fenómenos de transporte en la ingeniería química*. Barcelona: Reverté.

Luyben, William. L. (2006). Plant wide control of an isopropyl alcohol dehydration process. *AIChE Journal*, 52(6), 2290–2296. doi:10.1002/aic.10807

Robles, P. A., Graber, T. A., & Aznar, M. (2009). Prediction by the ASOG method of liquid–liquid equilibrium for binary and ternary systems containing 1-alkyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate. *Fluid Phase Equilibria*, 287(1), 43–49. doi:10.1016/j.fluid.2009.09.014

Robles, P. A., Graber, T. A., & Aznar, M. (2010). Prediction of liquid–liquid equilibrium for ternary systems containing ionic liquids with the tetrafluoroborate anion using ASOG. *Fluid Phase Equilibria*, 296(2), 154–158. doi:10.1016/j.fluid.2010.03.018

Rodriguez, Donis. I., Acosta, Esquijarosa. J., Gerbaud, V., Joulia, X., & Pardillo, Fondevila. E. (2005). Separation of n-hexane–ethyl acetate mixtures by azeotropic batch distillation with heterogeneous entrainers. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 44(1), 131–137. doi:10.1016/j.cep.2004.05.006

Rodriguez-Donis, I., Pardillo-Fontdevila, E., Gerbaud, V., & Joulia, X. (2001). Synthesis, experiments and simulation of heterogeneous batch distillation processes. *Computers & Chemical Engineering*, 25(4–6), 799–806. doi:10.1016/S0098-1354(01)00667-6

Seider, W. D., Seader, J. D., & Lewin, D. R. (2003). *Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis, and Evaluation* (2nd ed.). Wiley.

Skouras, S., Kiva, V., & Skogestad, S. (2005). Feasible separations and entrainer selection rules for heteroazeotropic batch distillation. *Chemical Engineering Science*, 60(11), 2895–2909. doi:10.1016/j.ces.2004.11.056

Smith, J. M., Van Ness, Hendrick. C., & Abbott, Michael. B. (2005). *Introduction to chemical engineering thermodynamics*. New York: McGraw -Hill.

Sommer, Stefan., & Melin, Thomas. (2004). Design and Optimization of Hybrid Separation Processes for the Dehydration of 2-Propanol and Other Organics. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 43(17), 5248–5259. doi:10.1021/ie034194d

Treybal, Robert. E. (1988). *Operaciones de transferencia de masa* (2nd ed.). México: McGraw-Hill.

Turton, Richard., Bailie, Richard. C., Whiting, Wallace. B., & Shaeiwitz, Joseph. A. (2008). *Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes* (2nd ed.). Prentice Hall.

Van Dongen, David B., & Doherty, Michael. F. (1985). Design and synthesis of homogeneous azeotropic distillations. 1. Problem formulation for a single column. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 24(4), 454–463. doi:10.1021/i100020a010

Walas, S. M. (1990). Chemical Process Equipment: Selection and Design. Butterworth-Heinemann.

Wang, C. J., Wong, D. S. H., Chien, I. L., Shih, R. F., Liu, W. T., & Tsai, C. S. (1998). Critical Reflux, Parametric Sensitivity, and Hysteresis in Azeotropic Distillation of Isopropyl Alcohol + Water + Cyclohexane. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 37(7), 2835–2843. doi:10.1021/ie970855t

Wang, San-Jang, Wong, David. S. H., & Yu, Shuh-Woei. (2008). Effect of Entrainer Loss on Plant-Wide Design and Control of an Isopropanol Dehydration Process. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 47(17), 6672–6684. doi:10.1021/ie8002683

Zhigang, Lei., Jinchang, Zhang., & Biaohua, Chen. (2002). Separation of aqueous isopropanol by reactive extractive distillation. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, 77(11), 1251–1254. doi:10.1002/jctb.700

2. METODOLOGÍA

RESUMEN

En este capítulo se menciona el procedimiento realizado para llevar a cabo este estudio, se nombran los equipos empleados y se incluyen algunas fotografías. Adicionalmente, se muestran factores importantes, como el modelo termodinámico de trabajo, la presión y el método de análisis para la lectura de la pureza del compuesto de interés, IPA.

2.1. METODOLOGÍA

2.1.1. Estudio de los diagramas ternarios

Haciendo uso del software Aspen Plus se elaboraron los diagramas ternarios a 0.84 atm y empleando el modelo NRTL, ya que es el más apropiado para sistemas químicos no ideales y también puede ser usado para ELV y ELL (Luyben and Chien, 2010) de la mezcla IPA-agua con tolueno, etilacetato, ciclohexano, ciclohexanona, n-butilacetato, isobutanol, o xileno, n-butanol, metanol, glicerol, monoetilenglicol, dietilenglicol, metoxipropanolacetato, etanol y butil glicol éter empleados como agentes de arrastre; incluyendo las curvas de residuo con sus nodos y sillas para evaluar la factibilidad topológica y las curvas de equilibrio con los respectivos azeótropos de la mezcla.

2.1.2. Elaboración de esquemas de separación

Para los agentes de arrastre factibles y termodinámicamente posibles, se elaboraron los esquemas de separación, tomando como punto de partida una mezcla M1. Dependiendo del diagrama ternario y de los azeótropos formados, esta corresponde al azeótropo IPA-agua con el agente de arrastre o al mismo azeótropo con una dilución en agua. Sin embargo, para los agentes de arrastre, monoetilenglicol, dietilenglicol, glicerol y metoxipropanolacetato no se elaboró ningún camino de destilación, puesto que estos no presentan límites de destilación debido a que las curvas de residuo tienen la misma forma general (Wankat, 2008).

Para la elaboración de estos esquemas se usó el programa Inkscape, que es un software gratuito y permite dibujar por medios de líneas cada uno de los procesos

con los que se lleva a cabo la separación. Adicional a esto y con base en el esquema, se realizaron los diagramas de bloques del proceso de cada uno de los solventes, empleando el software DIA, incluyendo sus flujos y composiciones que se calcularon usando la regla de la palanca (Biegler *et al.*, 1997) y para los agentes de arrastre sin camino de destilación, se realizaron los diagramas con base en el numeral 2.1.4 correspondiente a la simulación.

2.1.3. Selección de los agentes de arrastre

Se realizó un análisis económico para cada uno de los solventes, teniendo en cuenta la cantidad de solvente a emplear, la cantidad de IPA recuperado y el flujo de desechos generados.

Se tomó como base el costo nulo para la selección de los agentes más apropiados de la lista proporcionada por la compañía Invesa S.A, el cual corresponde al costo de incineración de los 1800 kg/mes generados en Invesa S.A y así se escogieron los agentes de arrastre que presentaron un costo menor comparados con la alternativa nula.

Es de gran importancia resaltar que a los agentes sin límite de destilación no se les realizó este análisis, puesto que no se contaba con los datos necesarios. Sin embargo, se cuenta con un análisis de costos para estos con los datos reportados en la simulación.

2.1.4. Simulación

Se procedió con la simulación en continuo de monoetilenglicol, dietilenglicol, glicerol y metoxipropanolacetato, correspondientes a los agentes que no presentaron límite de destilación y según el procedimiento redactado anteriormente, se seleccionaron o-xileno, ciclohexanona, isobutanol y metanol para este método. Esta simulación tuvo como finalidad observar que se podía llegar a obtener del proceso de separación. Se usó el software comercial Aspen Plus y se simuló partiendo de un flujo de alimentación azeotrópico de IPA-agua de 0.05996 Kmol/h con sus respectivas composiciones 0.6742 moles de IPA y 0.3258 moles de agua y el flujo del agente de arrastre correspondiente; datos que fueron extraídos de los diagramas de bloques. Para el caso de los agentes sin límite de destilación, la cantidad de solvente a emplear, se calculó con base en el libro

ingeniería de procesos de separación (Wankat, 2008). Se empleó una presión atmosférica de 0.84 atm exceptuando el monoetilenglicol que se modeló a 1 atm, debido a que en la simulación no fue posible a una presión menor y se utilizaron los paquetes termodinámicos ENRTL-RK y NRTL para el caso de los agentes sin límite de destilación.

2.1.5. Pruebas de laboratorio

Debido a que Invesa S.A no cuenta con torres de destilación y la idea principal era la separación de IPA-agua con el menor costo posible, se realizó un montaje a escala de laboratorio, con los agentes de arrastre seleccionados anteriormente, empleando los siguientes materiales y equipos disponibles de la universidad EAFIT:

- Decantador de 5000 ml
- Torre de destilación en vidrio borosilicato
- Termómetro
- Hidrómetro
- Beaker de 5000 ml y de 2500 ml
- Probeta de 250 ml
- Cronómetro
- Torre de enfriamiento
- Bomba peristáltica
- Plancha de calentamiento
- Ciclohexanona
- Metanol
- Monoetilenglicol
- Mezcla IPA-agua

El proceso consistió en una destilación batch empleando la torre de destilación en vidrio borosilicato para realizar la separación con ciclohexanona, que presenta equilibrio líquido-líquido, metanol, que no presenta este tipo de equilibrio y monoetilenglicol, que no presenta límite de destilación y por lo tanto, fue apto para modelarse por destilación extractiva. Se hizo la elección de estos tres solventes, debido a que presentaron una pureza superior al 90% molar en la simulación.

Para el primer caso, a la muestra IPA-agua se le adicionó la ciclohexanona, se sometió a destilación y la muestra obtenida en el balón se dejó en reposo por 24

horas para lograr una separación de fases ya que la mezcla presenta equilibrio líquido-líquido; sin embargo, esta separación no se logró, sometiéndose así cierta cantidad del decantador a destilación. El proceso terminó cuando no se lograba más destilado.

En el caso del metanol que solo presentó equilibrio líquido-vapor, la muestra a separar se le adicionó el agente de arrastre y se sometió inmediatamente a calentamiento, lográndose así el primer destilado; lo restante del balón se somete a calentamiento de nuevo para lograr un segundo destilado. Este último terminó cuando se obtuvo el volumen deseado según el balance de masa.

Finalmente, para el monoetilenglicol, se alimentó la muestra IPA-agua al balón de la torre y el agente de arrastre se pre-calentó hasta alcanzar 80 °C, posteriormente fue bombeado a la torre cuando se logró la primera gota condensada de la muestra que había en el balón. El proceso culminó cuando se obtuvo el volumen calculado según el balance de masa.

En cada proceso, se tomaban muestras periódicas para ser analizadas.

2.1.6. Análisis de pureza

Inicialmente se tomaron muestras del destilado de cada una de las pruebas realizadas en el laboratorio y se hizo medición de la densidad empleando un densímetro para luego leer el porcentaje de pureza del isopropanol interpolando este valor con la temperatura en las tablas de reportes del manual del ingeniero químico (Perry *et al.*, 1992). Posteriormente, las muestras más representativas por densidad son sometidas a la prueba de Karl Fischer que es un método usado en química analítica que utiliza una valoración volumétrica para determinar trazas de agua en una muestra.

2.1.7. Comparación de resultados

Se compararon los resultados de la pureza del IPA, obtenidos por la simulación y los obtenidos en el laboratorio y se observaron las diferencias en cuanto a la pureza en estos dos procesos. Adicional a esto, se observaron las diferencias entre los costos preliminares y los costos de la simulación.

2.1.8. Selección del agente arrastre apropiado

De acuerdo a los resultados obtenidos, se seleccionó el agente de arrastre que proporcionó un alto grado de pureza del IPA y fue de bajo costo en la separación de la mezcla azeotrópica IPA-agua.

2.1.9. Entrega de informe

Después de finalizar todos los procesos anteriormente redactados y determinar cuál es el agente de arrastre apropiado, se realizó un informe que contiene todo lo relacionado con esta investigación, incluyendo los diagramas ternarios, la simulación, los reportes de pruebas de laboratorio y las recomendaciones dadas para la compañía Invesa S.A.

CONCLUSIONES

Para la elección del agente que mejor resultados alcanzó, se tuvo que realizar una serie de pasos con el fin de ir descartando en cada uno de ellos agentes de arrastre. Se inició con una clasificación por grupos dependiendo del comportamiento del agente con la mezcla del estudio, donde se comenzó con el descarte de los agentes termodinámicamente no posibles. Luego, con un análisis preliminar de costos, realizado con base en los datos obtenidos según el camino de destilación elegido, se escogieron los agentes más económicos, finalmente con la simulación se realizó un filtro de agentes de acuerdo a la pureza que se logró obtener para así llevar el procedimiento a la sección experimental y seleccionar el agente de mejores resultados.

BIBLIOGRAFÍA

Biegler, L. T., Grossmann, I. E., & Westerberg, A. W. (1997). Systematic Methods of Chemical Process Design (1st ed.). Prentice Hall.

Luyben, W. L., & Chien, I-Lung. (2010) Design and control of distillation systems for separating azeotropes (1st ed.). John Wiley & Sons, Inc. New Jersey.

Perry, H. R., Don W. Green., & Maloney, James. O. (1992). *Chemical Engineer's Handbook*. (6th ed.). Vol. 3. 6 vols. Kansas: McGraw-Hill.

Wankat, P. C. (2008). *Ingeniería de procesos de separación* (2 ed.). Prentice Hall. México

3. ESQUEMAS DE SEPARACIÓN

RESUMEN

Invesa S.A tiene la necesidad de recuperar isopropanol (IPA) de una mezcla azeotrópica con agua generada como subproducto de procesos de polimerización. Se generan 2000 kg/mes de la solución de IPA-Agua con una concentración aproximada entre 84% y 88% en peso de IPA y se emplean únicamente 200 kg/mes en otro proceso a dicha concentración; los 1800 kg producidos mensualmente restantes no se reutilizan y se incineran ocasionando un sobre costo de COP \$1200/ kg de solución azeotrópica. Debido al comportamiento azeotrópico, no es posible separar cada uno de los compuestos por métodos convencionales, por lo que se deseó estudiar una alternativa de destilación con solventes existentes en Invesa S.A; (e.g., metanol, etanol, n-butanol, isobutanol, metoxipropanolacetato, etilacetato, monoetilenglicol, butilacetato, glicerol, xileno, tolueno, alisol, dietilenglicol, varsol, thinner, butil glicol éter, tributilcitrato y ciclohexanona). Se deseó con esto que el IPA obtenido fuera de una pureza superior a la azeotrópica.

3.1. EVALUACIÓN DE ESQUEMAS DE SEPARACIÓN

Previo a los esquemas de separación fue necesario verificar la factibilidad topológica del sistema, mediante las curvas de residuo, las cuales se elaboraron con el software Aspen plus, empleando el modelo termodinámico NRTL, es el más apropiado para sistemas químicos no ideales y también puede ser usado para ELV y ELL (Luyben and Chien, 2010) a la presión atmosférica de Medellín correspondiente a 0,84 atm.

De acuerdo a los esquemas de separación con cada solvente, se obtuvieron cinco grupos para los diagramas. A continuación se presentan por grupos de solventes generados las curvas de residuo de cada sistema con sus respectivos nodos y puntos de silla, los diagramas ternarios y los diagramas de bloques con sus respectivos balances de materia, calculados por medio de la regla de la palanca. En cuanto a los agentes que no presentaron límite de destilación se hizo uso de los datos determinados por la simulación para la elaboración de estos diagramas.

Los solventes varsol, thinner, tributilcitrato y alisol son descartados a priori por constituirse en mezcla de sustancias que por una parte complicarían la separación

y por otra, porque la información respecto a dichos solventes es cambiante (De acuerdo con la fuente cambia la composición).

3.1.1. Grupo 1: Azeótropos ternarios y binarios con separación líquido-líquido

Estos diagramas cuentan con tres azeótropos binarios (i.e., con dos componentes) y un azeótropo ternario (i.e., con tres componentes) y presentan además equilibrio líquido-líquido. De los catorce solventes las sustancias que presentan dicho comportamiento se tienen tolueno, etilacetato, y ciclohexano. Se cuenta con antecedentes de la factibilidad de la separación de la mezcla IPA-Agua con Ciclohexano (Wang *et al.*, 1998) y con tolueno (Georgoulaki and Korchinsky, 1997). De las otras sustancias no existe, a nuestro mejor saber y entender, precedentes de separaciones.

3.1.1.1. Separación con tolueno

En la Figura 3.1 se muestra las curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol-agua-tolueno, en la Tabla 3.1 se presenta la clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol-agua-tolueno y verificación de factibilidad.

En el esquema de separación para el sistema ternario isopropanol-agua-tolueno inicialmente se mezcla el azeótropo IPA-agua (K) con tolueno puro (I), generándose un punto M1, que es decantado para obtener una mezcla rica en agua (B) y una mezcla de los tres componentes (A), esta última mezcla se destila logrando tolueno puro (C) y una nueva mezcla de los tres componentes (D) que al juntarse con cierta cantidad de mezcla azeotrópica (K1) se logra un punto M2 que se destila alcanzando isopropanol puro (E) y un punto F como se muestra en la Figura 3.2; este último punto F es recirculado a la decantación como se observa en el diagrama de bloques para el sistema ternario Figura 3.3.

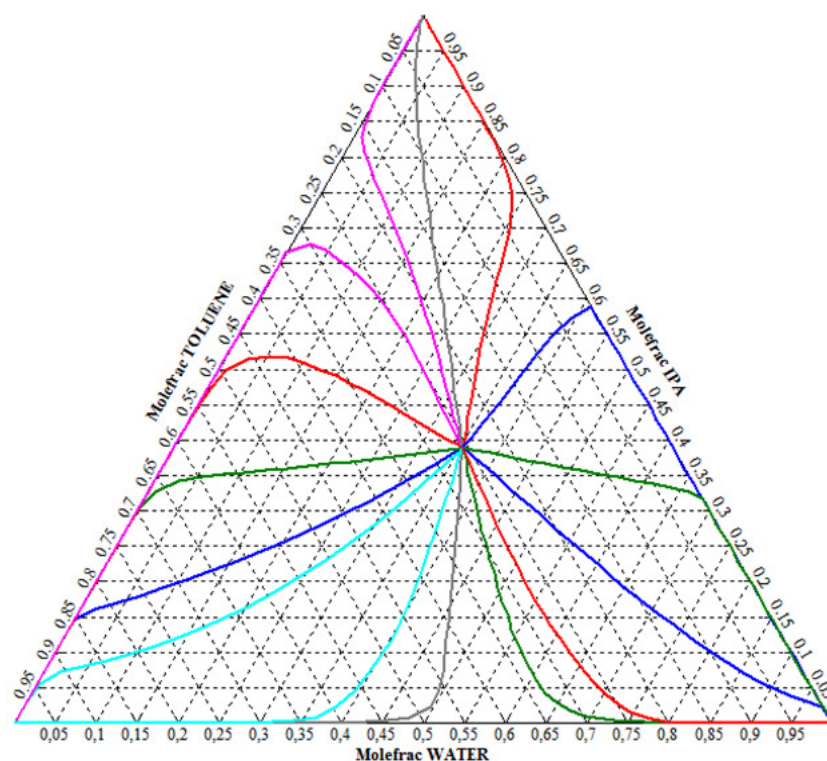


Figura 3.1. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol-agua-tolueno

Tabla 3.1. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol-agua-tolueno y verificación de factibilidad.

Agua - Isopropanol – Tolueno			
Número de componentes	Componentes	Clasificación	Temperatura (°C)
Un componente	Agua	Nodo Estable	95.2
	Isopropanol	Nodo Estable	77.75
	Tolueno	Nodo Estable	104.66
Dos componentes	Agua	Silla	75.91
	Isopropanol		
Dos componentes	Isopropanol	Silla	76.8
	Tolueno		
Dos componentes	Agua	Silla	79.85
	Tolueno		

Tres Componentes	Agua	Nodo Inestable	70.91
	Isopropanol		
	Tolueno		
Factibilidad	$4(1 - 0) + 2(0 - 3) + (3 - 0) = 1$		

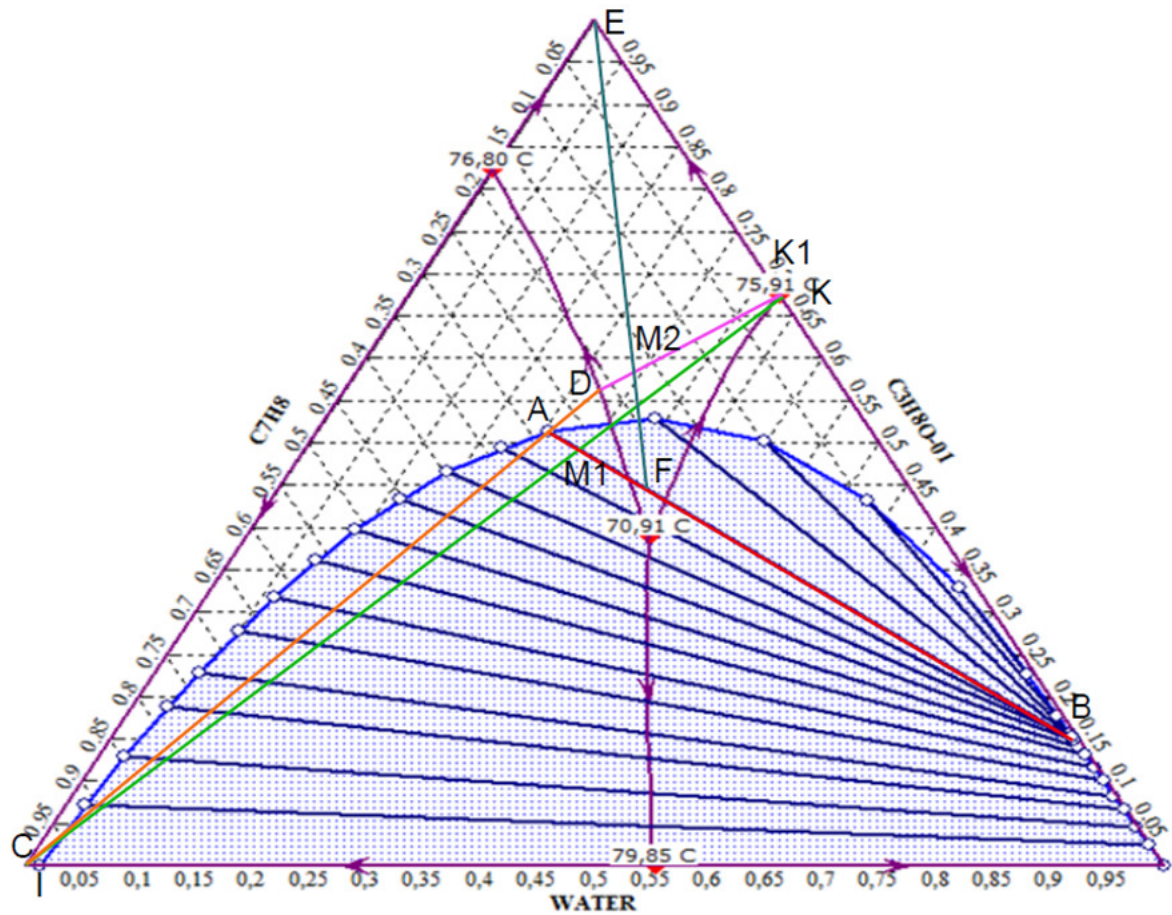


Figura 3.2. Esquema de separación para el sistema ternario isopropanol-agua-tolueno

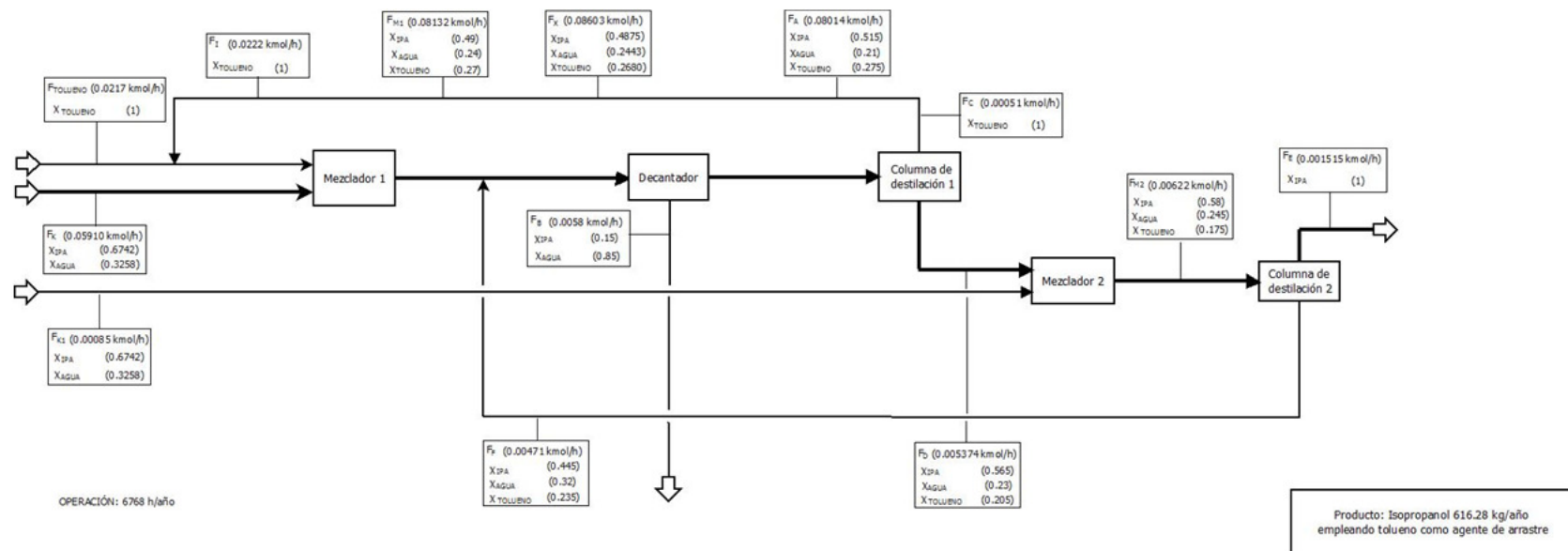


Figura 3.3. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua–tolueno

3.1.1.2. Separación con etilacetato

En la Figura 3.4 se muestra las curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–etilacetato, en la Tabla 3.2 se presenta la clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–etilacetato y verificación de factibilidad.

En el esquema de separación para el sistema ternario isopropanol–agua–etilacetato se mezcla el azeótropo (K) con una dilución de etilacetato en agua (I), formándose una mezcla M1 que se decanta para obtener una mezcla que contiene agua a una composición casi pura (B) y una mezcla de IPA-agua-etilacetato (A) que es destilada logrando etilacetato puro (C) y una nueva mezcla de los tres componentes (D) que al mezclarse con cierta cantidad de azeótropo (K1) se destila alcanzando isopropanol puro (E) y un punto F como se muestra en la Figura 3.5; este último punto F es recirculado a la decantación como se observa en el diagrama de bloques para el sistema ternario Figura 3.6.

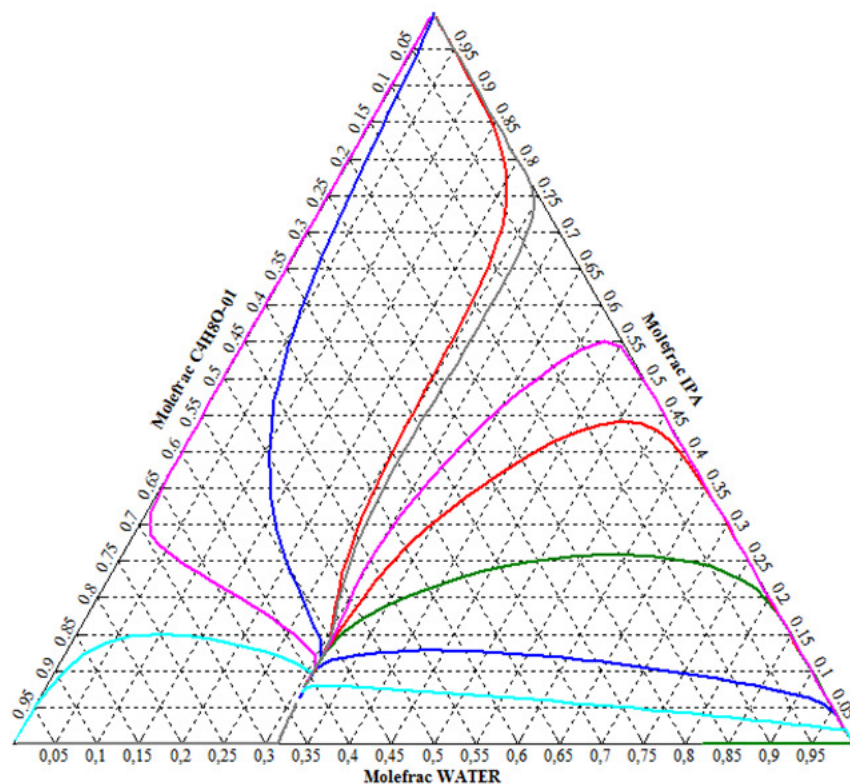


Figura 3.4. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–etilacetato

Tabla 3.2. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–etilacetato y verificación de factibilidad.

Agua - Isopropanol - Etilacetato			
Número de componentes	Componentes	Clasificación	Temperatura (°C)
Un componente	Agua	Nodo Estable	95.2
	Isopropanol	Nodo Estable	77.75
	Etilacetato	Nodo Estable	72.02
Dos componentes	Agua	Silla	75.91
	Isopropanol		
Dos componentes	Agua	Silla	66.8
	Etilacetato		
Dos componentes	Isopropanol	Silla	70.34
	Etilacetato		
Tres Componentes	Agua	Nodo Inestable	66.65
	Isopropanol		
	Etilacetato		
Factibilidad	4(1 − 0) + 2(0 − 3) + (3 − 0) = 1		

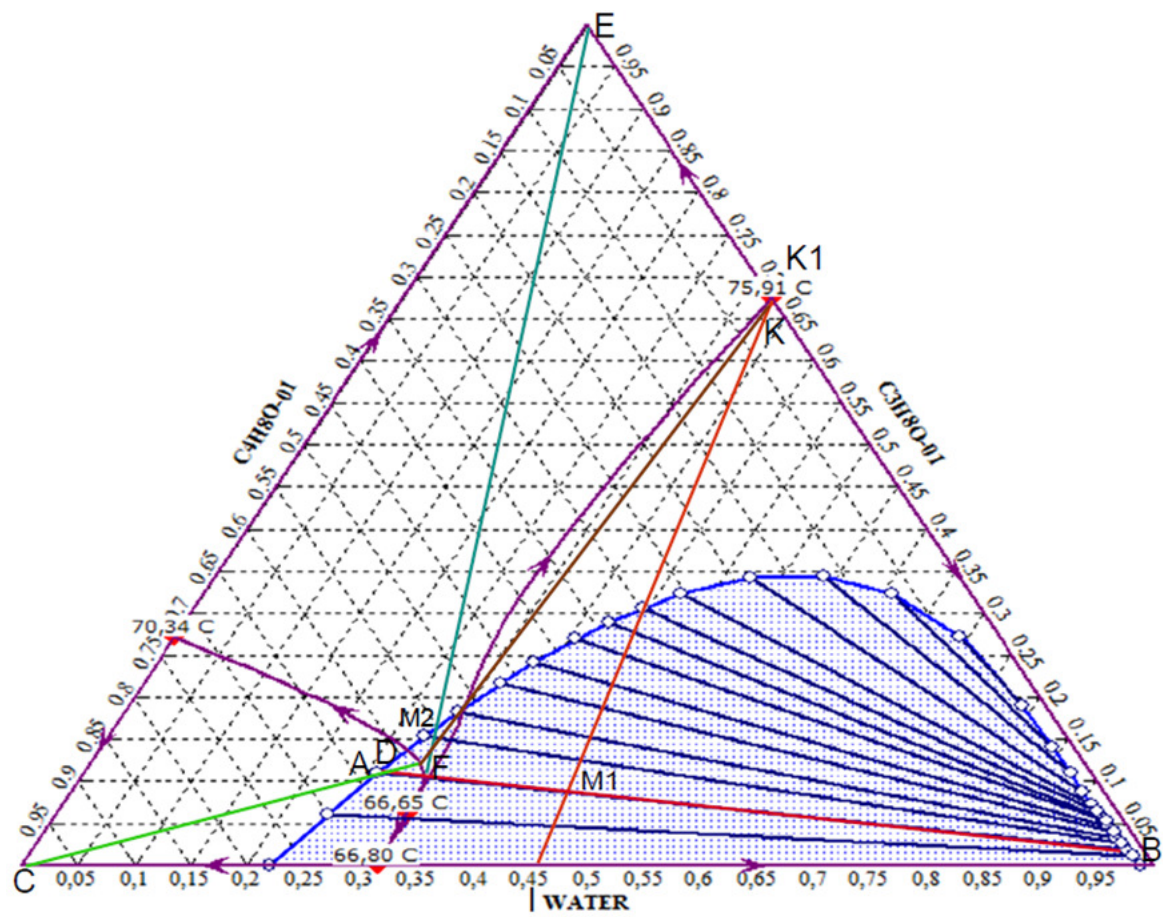


Figura 3.5. Esquema de separación para el sistema ternario isopropanol–agua–etilacetato

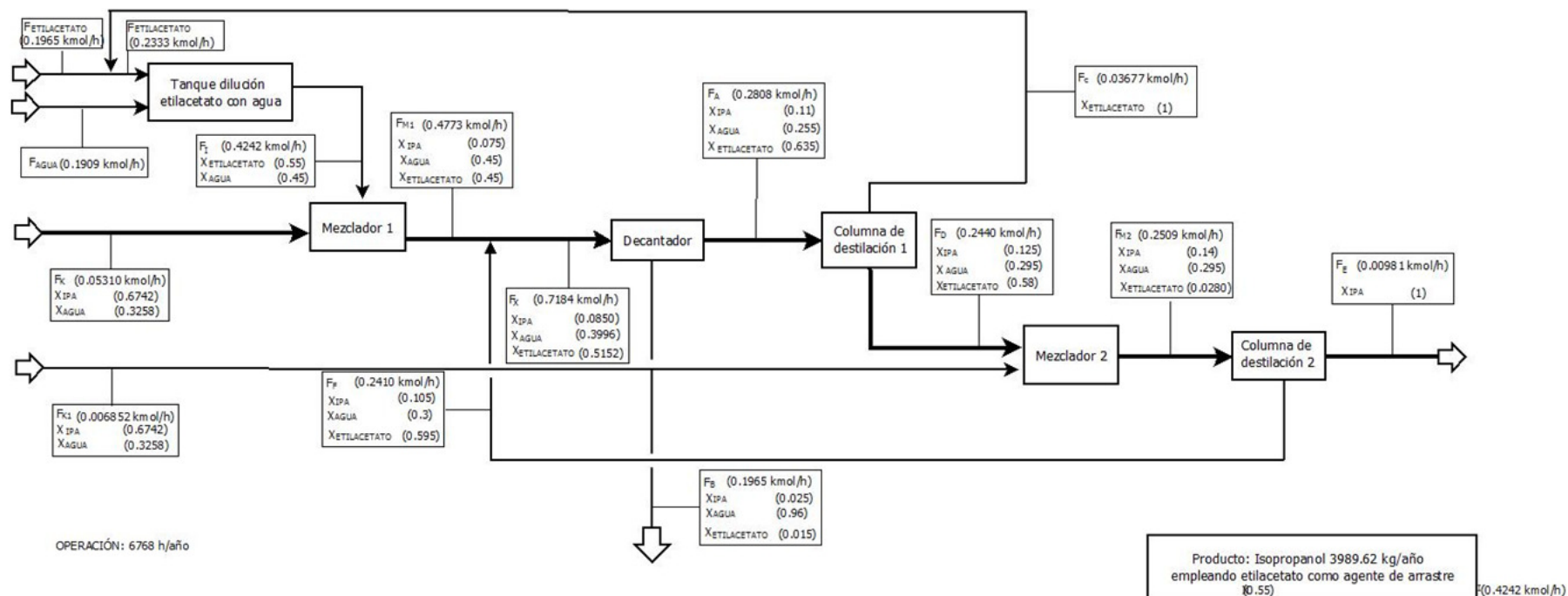


Figura 3.6. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua–etilacetato

3.1.1.3. Separación con ciclohexano

En la Figura 3.7, se muestra las curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–ciclohexano, en la Tabla 3.3 se presenta la clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–ciclohexano y verificación de factibilidad.

En el esquema de separación para el sistema ternario isopropanol–agua–ciclohexano se inicia mezclando el azeótropo (K) con ciclohexano puro (I) obteniéndose un punto M1 que se decanta, alcanzando una mezcla rica en ciclohexano (A) y una mezcla de los tres componentes (B); las dos mezclas (A, B) se destilan lográndose agua pura (E), ciclohexano puro (C) y dos puntos F y D que son mezclados (M2) y destilados obteniendo isopropanol puro (G) y una mezcla (H) como se muestra en la Figura 3.8; este último punto H es recirculado a la decantación como se observa en el diagrama de bloques para el sistema ternario la Figura 3.9

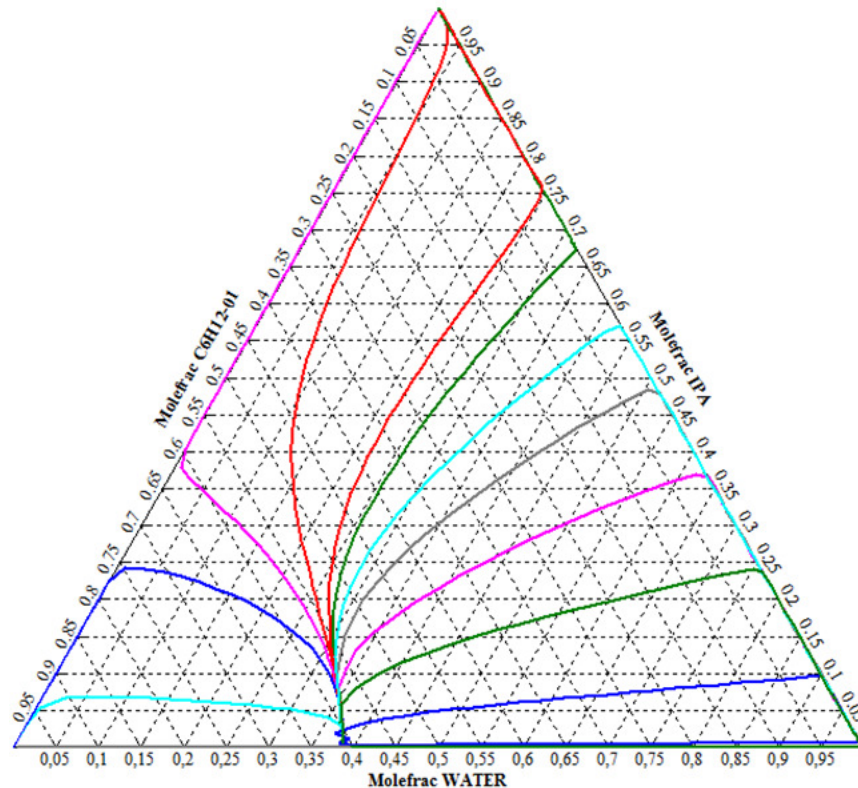


Figura 3.7. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua– ciclohexano

Tabla 3.3. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–ciclohexano y verificación de factibilidad.

Agua - Isopropanol - Ciclohexano			
Número de componentes	Componentes	Clasificación	Temperatura (°C)
Un componente	Agua	Nodo Estable	95.2
	Isopropanol	Nodo Estable	77.75
	Ciclohexano	Nodo Estable	75.1
Dos componentes	Agua	Silla	75.91
	Isopropanol		
Dos componentes	Agua	Silla	64.66
	Ciclohexano		
Dos componentes	Isopropanol	Silla	64.42
	Ciclohexano		
Tres Componentes	Agua	Nodo Inestable	59.62
	Isopropanol		
	Ciclohexano		
Factibilidad	4(1 – 0) + 2(0 – 3) + (3- 0) = 1		

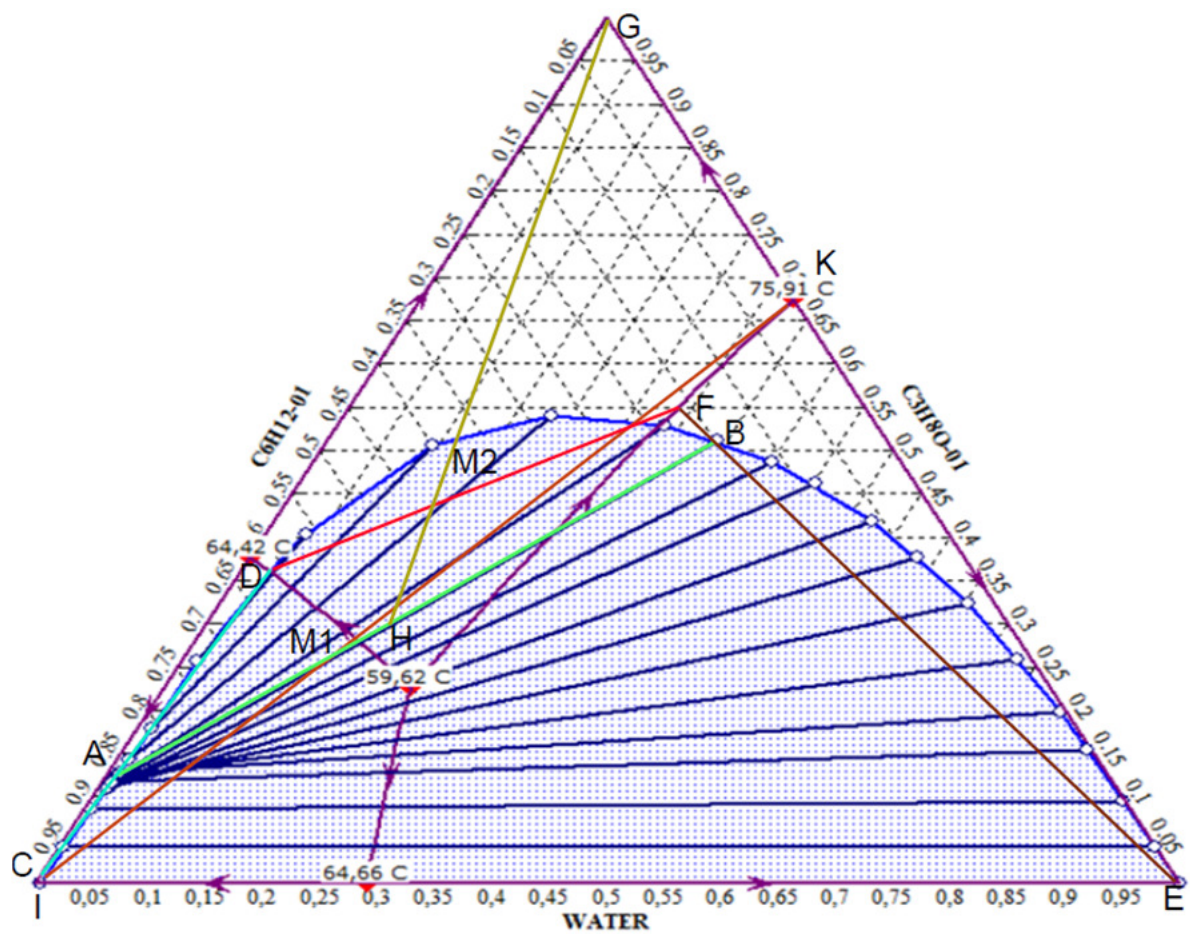


Figura 3.8. Esquema de separación para el sistema ternario isopropanol–agua–ciclohexano

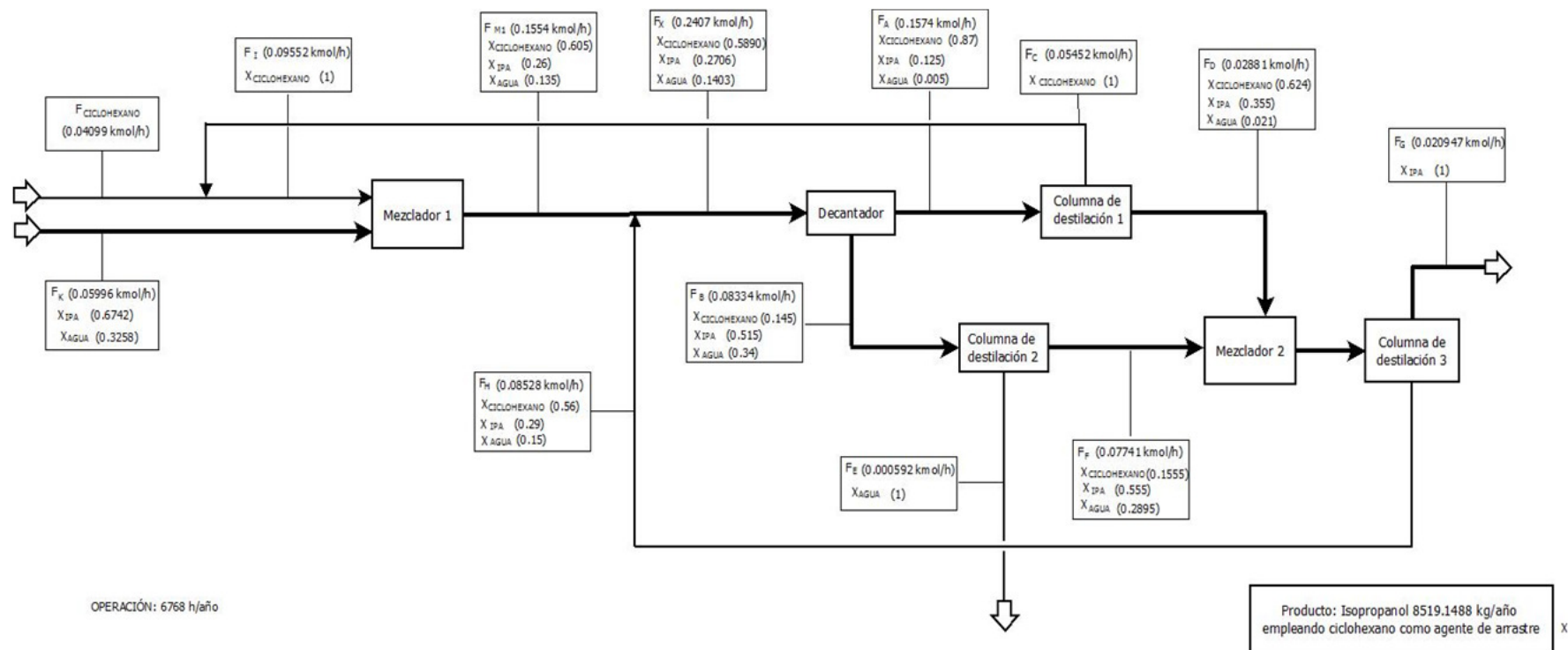


Figura 3.9. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua–ciclohexano

3.1.2. Grupo 2: Azeótropos binarios con separación líquido-líquido

Estos diagramas cuentan con dos azeótropos binarios y presentan equilibrio líquido-líquido. De los catorce solventes las sustancias que presentan dicho comportamiento se tienen ciclohexanona, n-butilacetato, isobutanol, o-xileno y n-butanol. No se cuenta con antecedentes de la factibilidad de la separación de la mezcla IPA-Agua con ninguna de estas sustancias.

3.1.2.1. Separación con ciclohexanona

En la Figura 3.10 se muestra las curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol-agua-ciclohexanona, en la Tabla 3.4 se presenta la clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol-agua-ciclohexanona y verificación de factibilidad.

En el esquema de separación para el sistema ternario isopropanol-agua-ciclohexanona se inicia mezclando el azeótropo (K) con ciclohexanona pura (I) lográndose un punto M1 que es destilado, obteniendo isopropanol puro (A) y una mezcla de IPA-agua-ciclohexanona (B) que al decantarse logra dos mezclas (C y D); la mezcla C se destila obteniendo ciclohexanona pura (E) y una mezcla (F) que es recirculada a la línea de destilación donde se obtiene el isopropanol puro (A) (Línea naranja) como se muestra en la Figura 3.11. En la Figura 3.12 se puede apreciar el diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol-agua-ciclohexanona

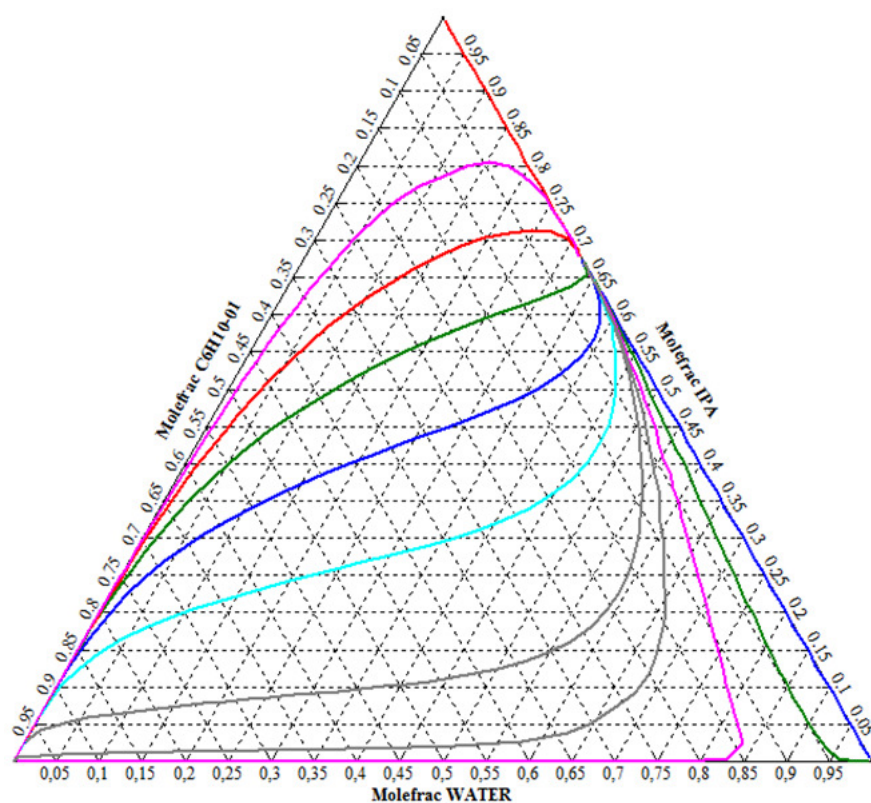


Figura 3.10. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–ciclohexanona

Tabla 3.4. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–ciclohexanona y verificación de factibilidad

Agua -Isopropanol - Ciclohexanona			
Número de componentes	Componentes	Clasificación	Temperatura (°C)
Un componente	Agua	Nodo Estable	95.2
	Isopropanol	Silla	77.75
	Ciclohexanona	Nodo Estable	148.81
Dos componentes	Agua	Nodo Inestable	75.91
	Isopropanol		
Dos componentes	Agua	Silla	92.99
	Ciclohexanona		
Factibilidad	$4(0 - 0) + 2(1 - 1) + (2 - 1) = 1$		

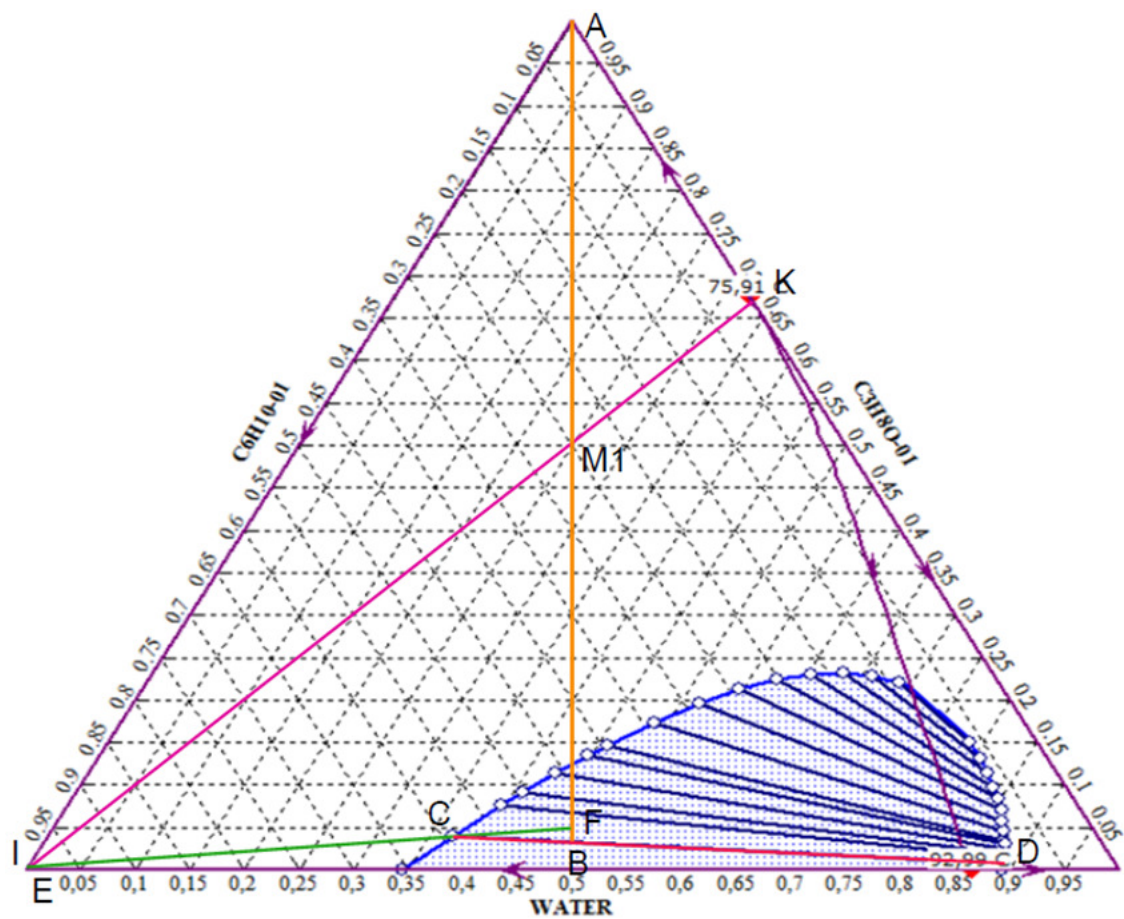


Figura 3.11. Esquema de separación para el sistema ternario isopropanol–agua–ciclohexanona

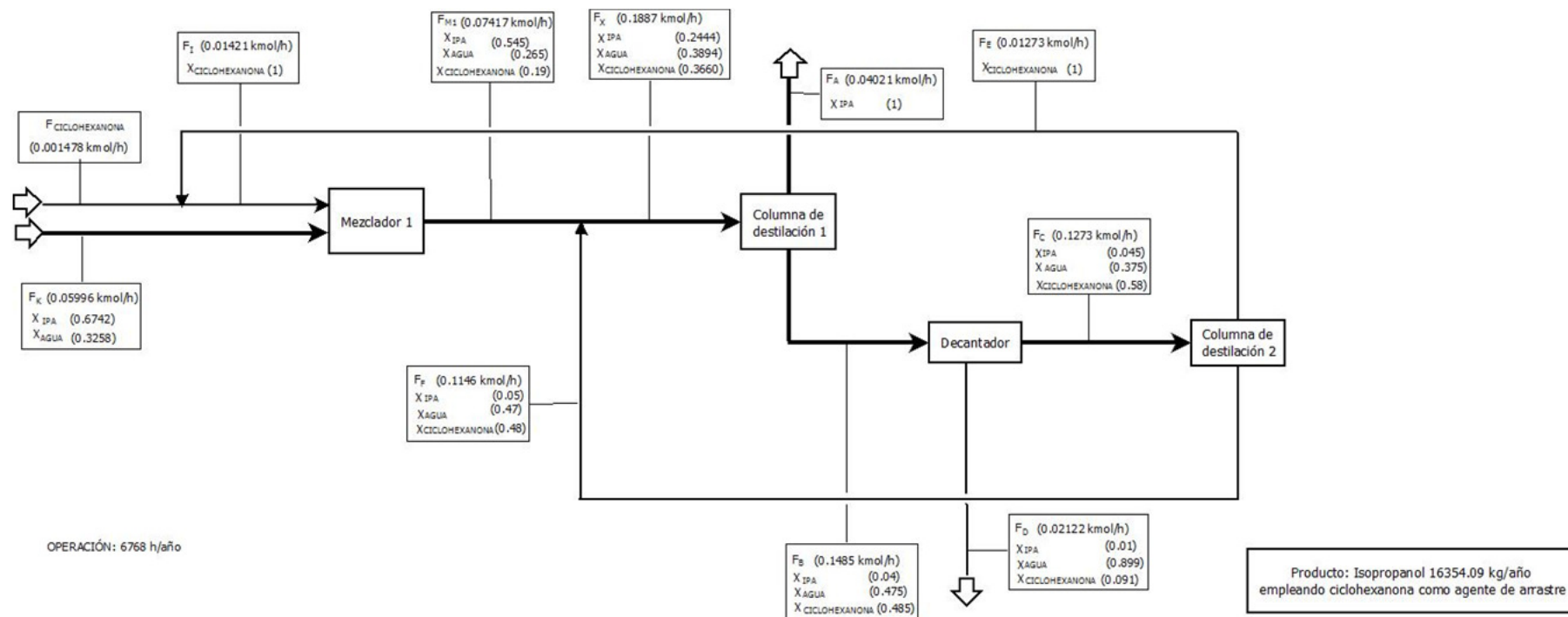


Figura 3.12. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol-agua-ciclohexanona

3.1.2.2. Separación con n-butilacetato

En la Figura 3.13 se muestra las curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol – agua – n-butilacetato, en la Tabla 3.5 se presenta la clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–n-butilacetato y verificación de factibilidad.

En el esquema de separación para el sistema ternario isopropanol–agua–n-butilacetato inicialmente se mezcla el azeótropo (K) con n-butilacetato puro (I), esta mezcla (M1) es destilada obteniendo isopropanol puro (A) y una mezcla de los tres componentes (B) que se decanta logrando agua pura (D) y una mezcla IPA-agua-n-Butilacetato (C) que al destilarse alcanza n-butilacetato puro (E) y una mezcla de los tres componentes (F) que es recirculada a la línea de destilación donde se obtiene el isopropanol puro (A) (Línea café) como se muestra en la Figura 3.14. En la Figura 3.15 se puede apreciar el diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua–n-butilacetato.

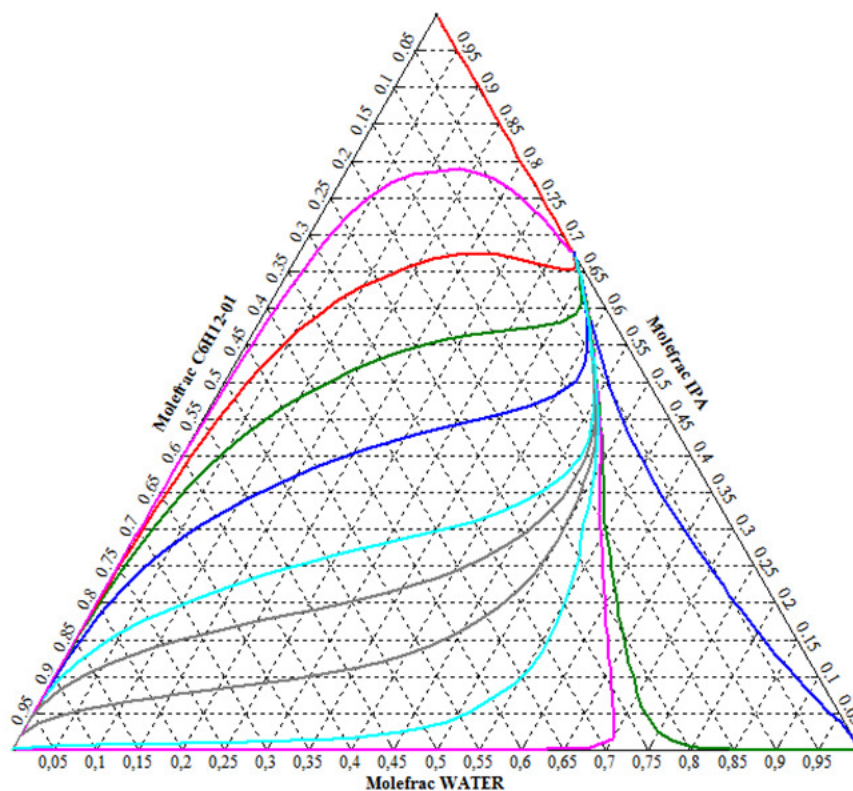


Figura 3.13. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–n-butilacetato

Tabla 3.5. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–n–butilacetato y verificación de factibilidad

Agua–Isopropanol–n-butilacetato			
Número de componentes	Componentes	Clasificación	Temperatura (°C)
Un componente	Agua	Nodo Estable	95.2
	Isopropanol	Silla	77.75
	n butilacetato	Nodo Estable	120.09
Dos componentes	Agua	Nodo Inestable	75.91
	Isopropanol		
Dos componentes	Agua	Silla	86.54
	n butilacetato		
Factibilidad	$4(0 - 0) + 2(1 - 1) + (2 - 1) = 1$		

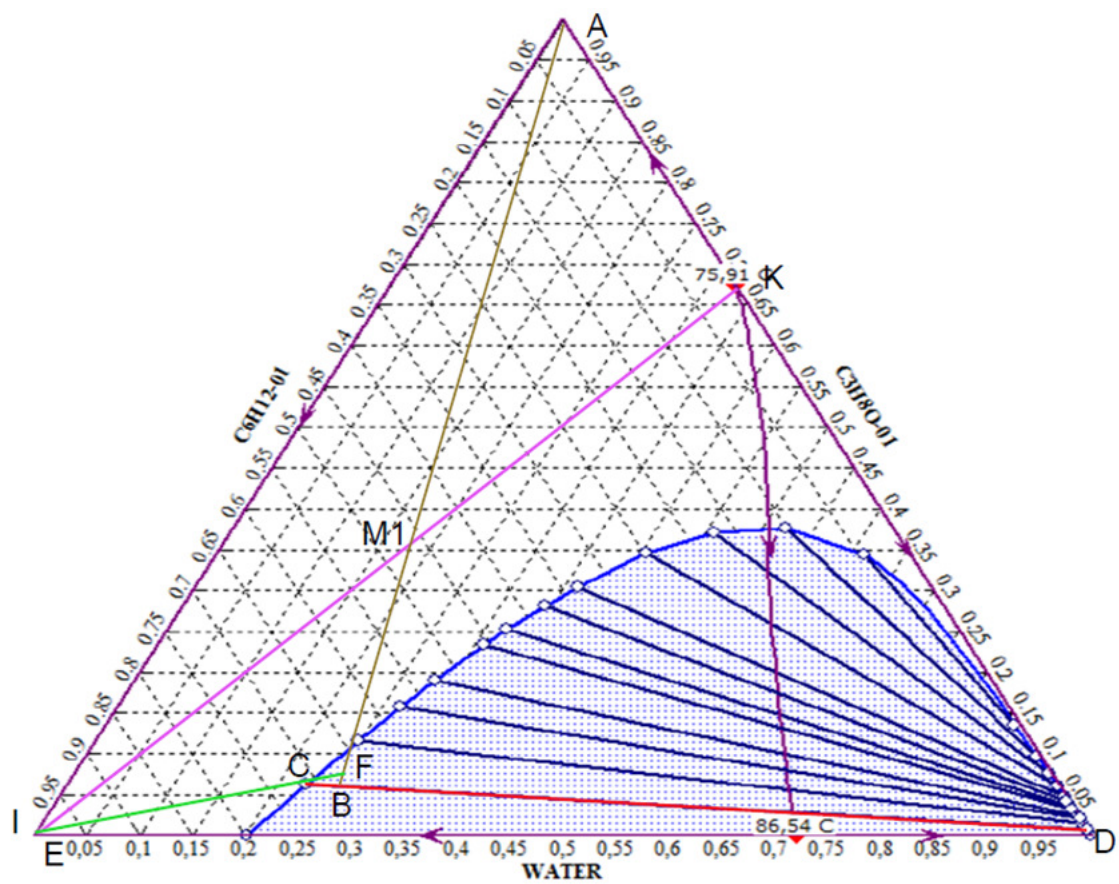


Figura 3.14. Esquema de separación para el sistema ternario isopropanol–agua–*n*-butilacetato.

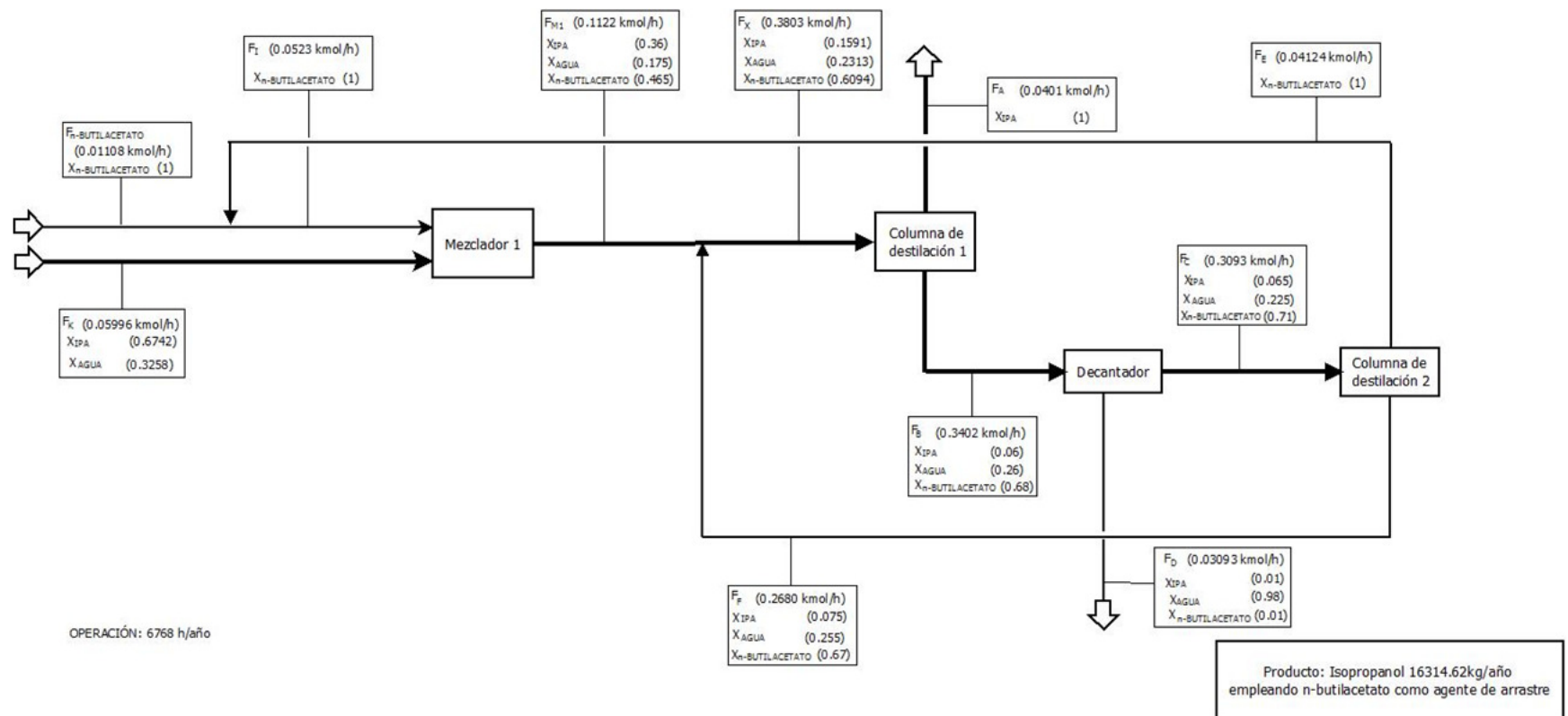


Figura 3.15. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol-agua-n-butilacetato

3.1.2.3. Separación con isobutanol

En la Figura 3.16 se muestra las curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–isobutanol, en la Tabla 3.6 se presenta la clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–isobutanol y verificación de factibilidad.

En el esquema de separación para el sistema ternario isopropanol–agua–isobutanol se mezcla el azeótropo (K) con isobutanol puro (I) lográndose un punto M1 que es destilado, obteniendo isopropanol puro (A) y una mezcla de IPA-agua-isobutanol (B) que se decanta para obtener una mezcla rica en agua (D) y una mezcla IPA-agua-isobutanol (C) que al destilarse alcanza isobutanol puro (E) y una mezcla de los tres componentes (F) que es recirculada a la línea de destilación donde se obtiene el isopropanol puro (A) (Línea morada) como se muestra en la Figura 3.17. En la Figura 3.18 se puede apreciar el diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua–isobutanol.

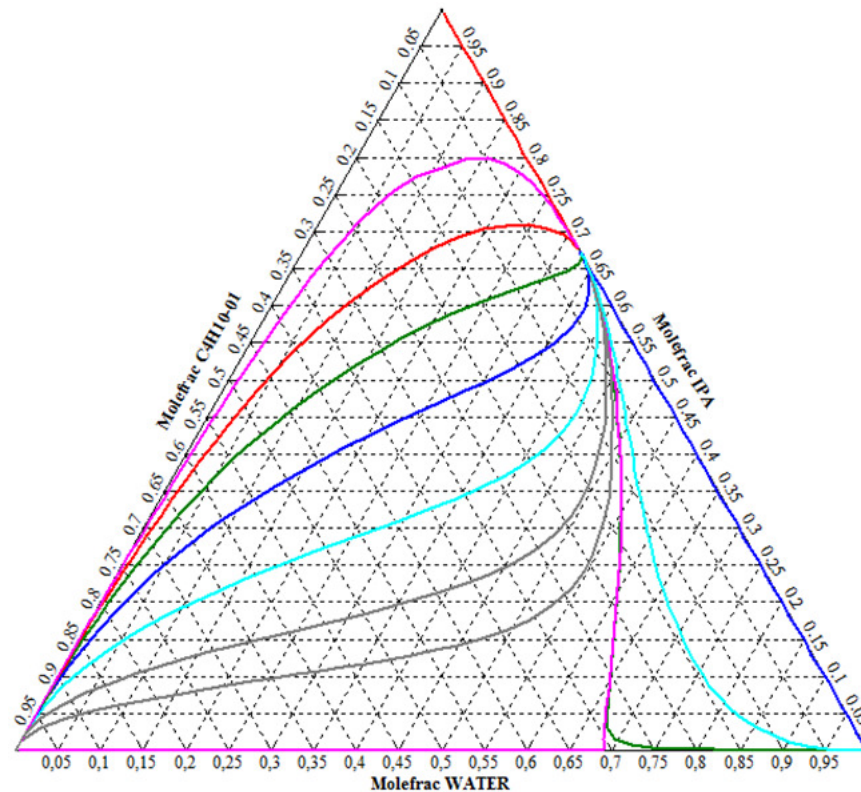


Figura 3.16. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–isobutanol

Tabla 3.6. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–isobutanol y verificación de factibilidad.

Agua - Isopropanol - Isobutanol			
Número de componentes	Componentes	Clasificación	Temperatura (°C)
Un componente	Agua	Nodo Estable	95.2
	Isopropanol	Silla	77.75
	Isobutanol	Nodo Estable	103.01
Dos componentes	Agua	Nodo Inestable	75.91
	Isopropanol		
Dos componentes	Agua	Silla	85.94
	Isobutanol		
Factibilidad	4(0 – 0) + 2(1 – 1) + (2- 1) = 1		

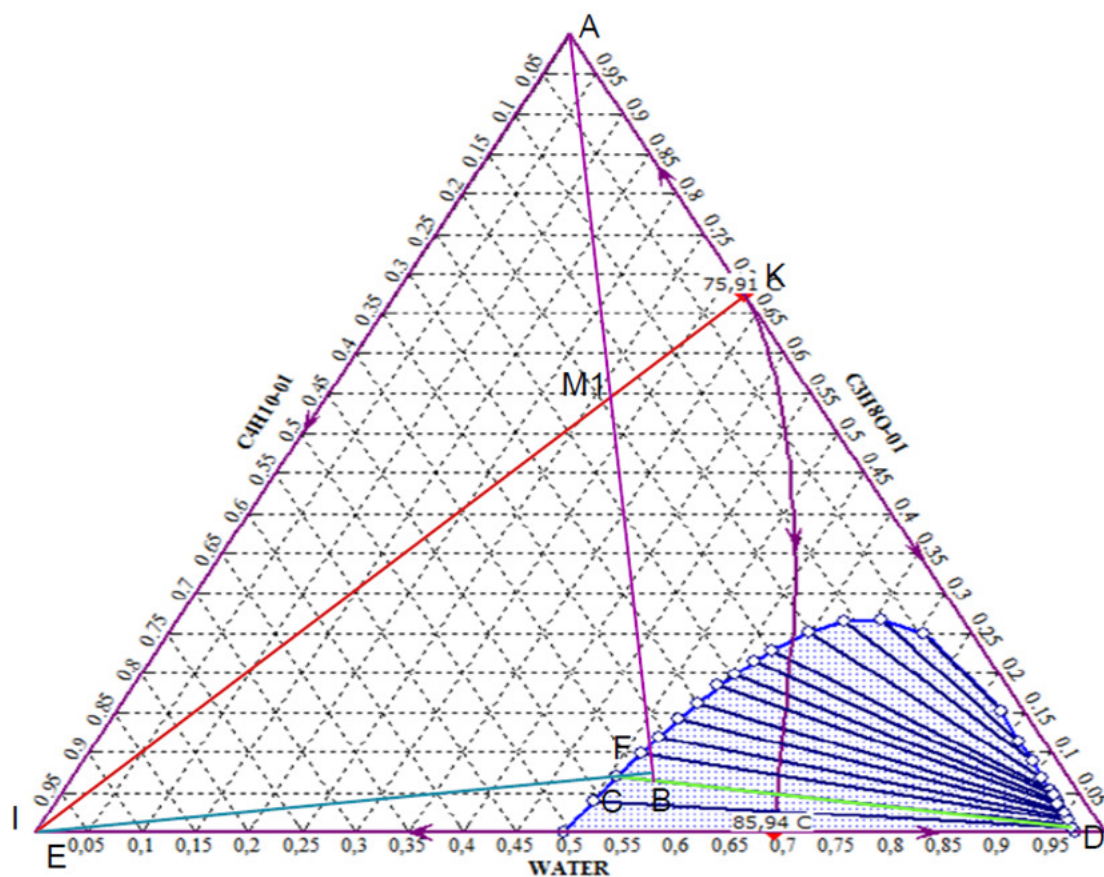


Figura 3.17. Esquema de separación para el sistema ternario isopropanol–agua–isobutanol

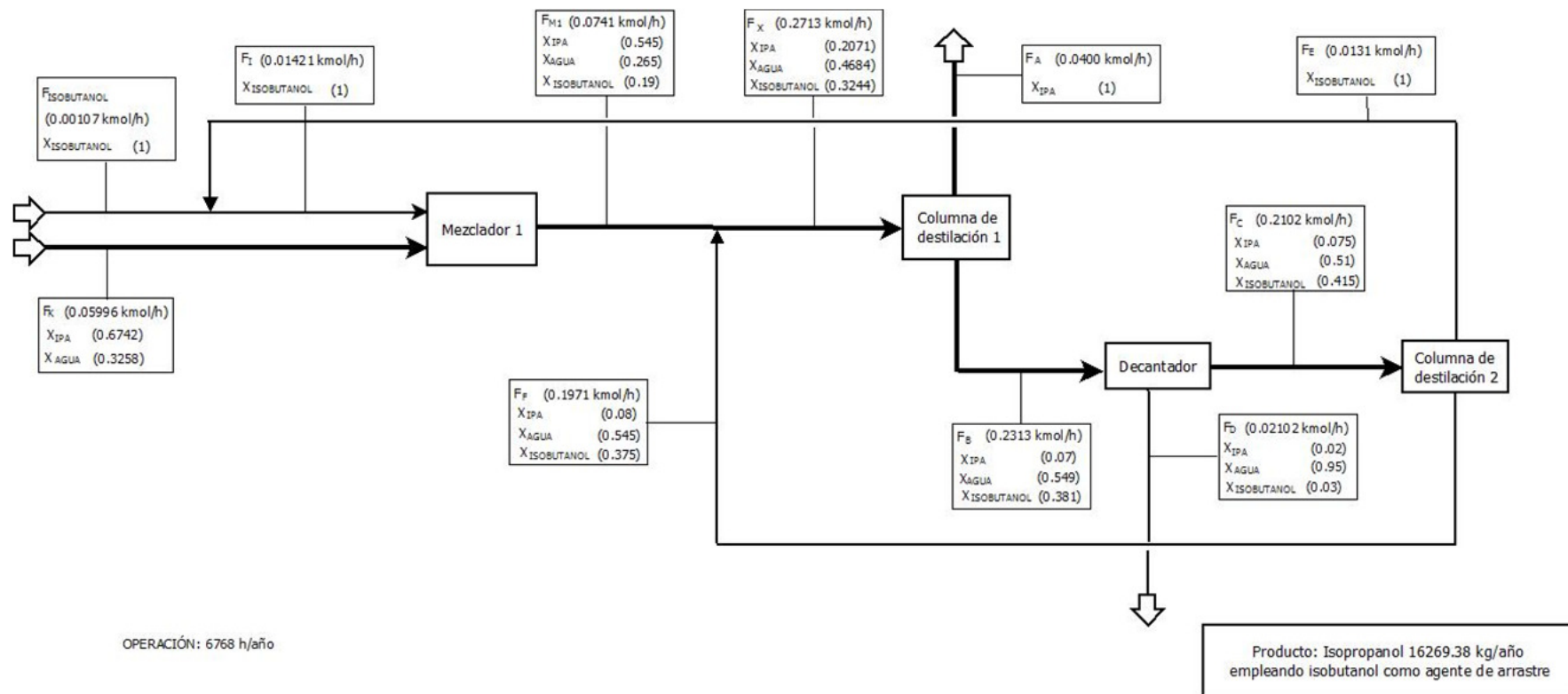


Figura 3.18. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua–isobutanol

3.1.2.4. Separación con o-xileno

En la Figura 3.19 se muestra las curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–o-xileno, en la Tabla 3.7 se presenta la clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–o-xileno y verificación de factibilidad.

En el esquema de separación para el sistema ternario isopropanol–agua–o-xileno se inicia mezclando el azeótropo (K) con una dilución de o-xileno en agua (I), lográndose un punto M1 que al decantarse obtiene agua pura (B) y una mezcla rica en O-xileno (A), que se destila adquiriendo O-xileno puro (C) y una mezcla de IPA-agua (D); esta mezcla (D) por destilación, obtiene isopropanol puro (E) y una mezcla de IPA-agua a composición azeotrópica (K1) que es recirculada a la mezcla azeotrópica (K) como se muestra en la Figura 3.20. En la Figura 3.21 se puede apreciar el diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua–o-xileno.

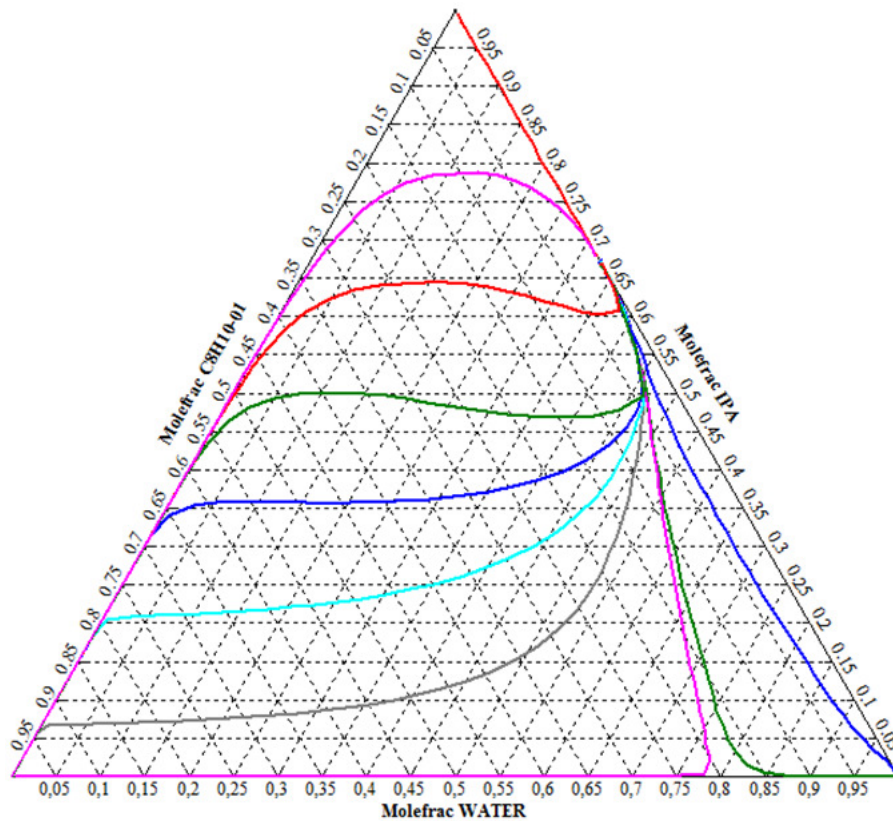


Figura 3.19. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–o-xileno

Tabla 3.7. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–o-xileno y verificación de factibilidad.

Agua - Isopropanol - O xileno			
Número de componentes	Componentes	Clasificación	Temperatura (°C)
Un componente	Agua	Nodo Estable	95.2
	Isopropanol	Silla	77.75
	O xileno	Nodo Estable	137.83
Dos componentes	Agua	Nodo Inestable	75.91
	Isopropanol		
Dos componentes	Agua	Silla	92.99
	O xileno		
Factibilidad	4(0 – 0) + 2(1 – 1) + (2 - 1) = 1		

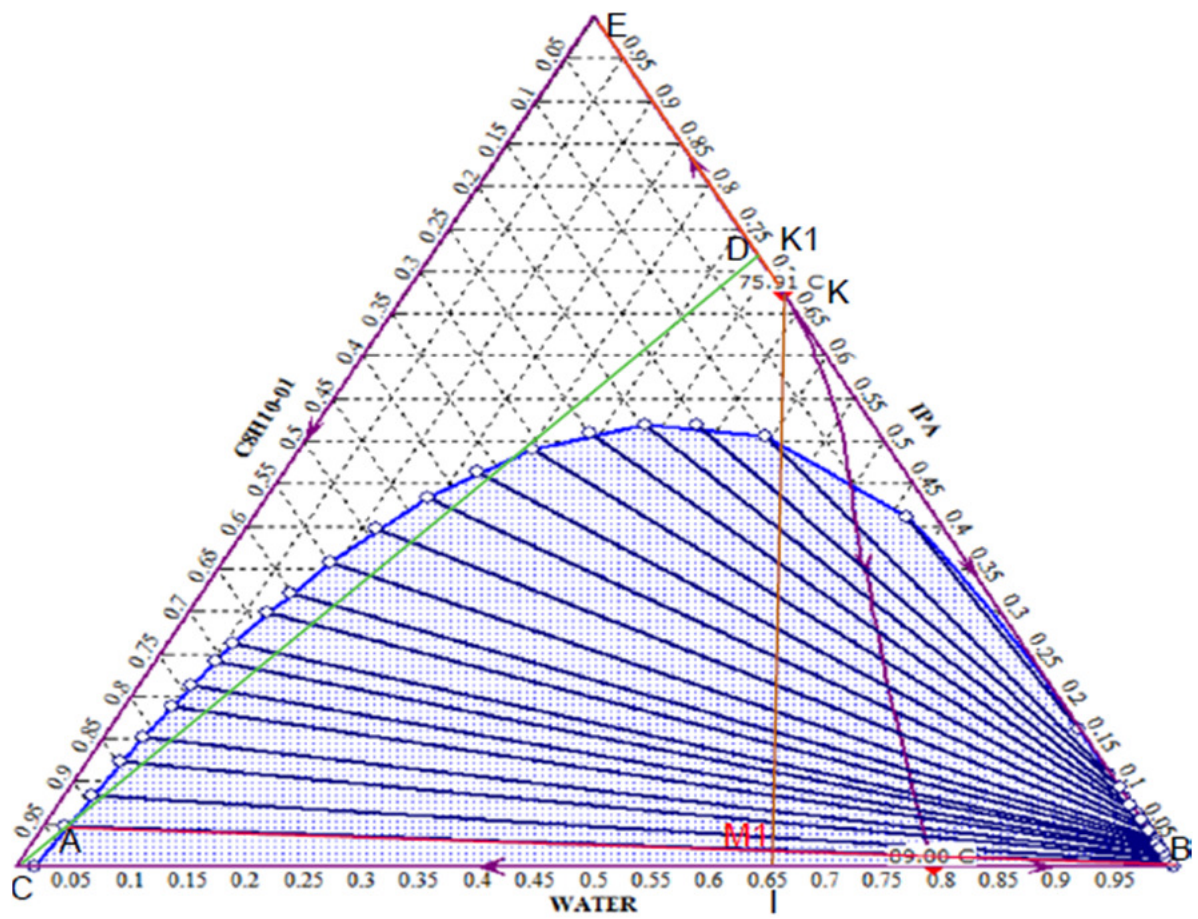


Figura 3.20. Esquema de separación para el sistema ternario isopropanol–agua–o-xileno

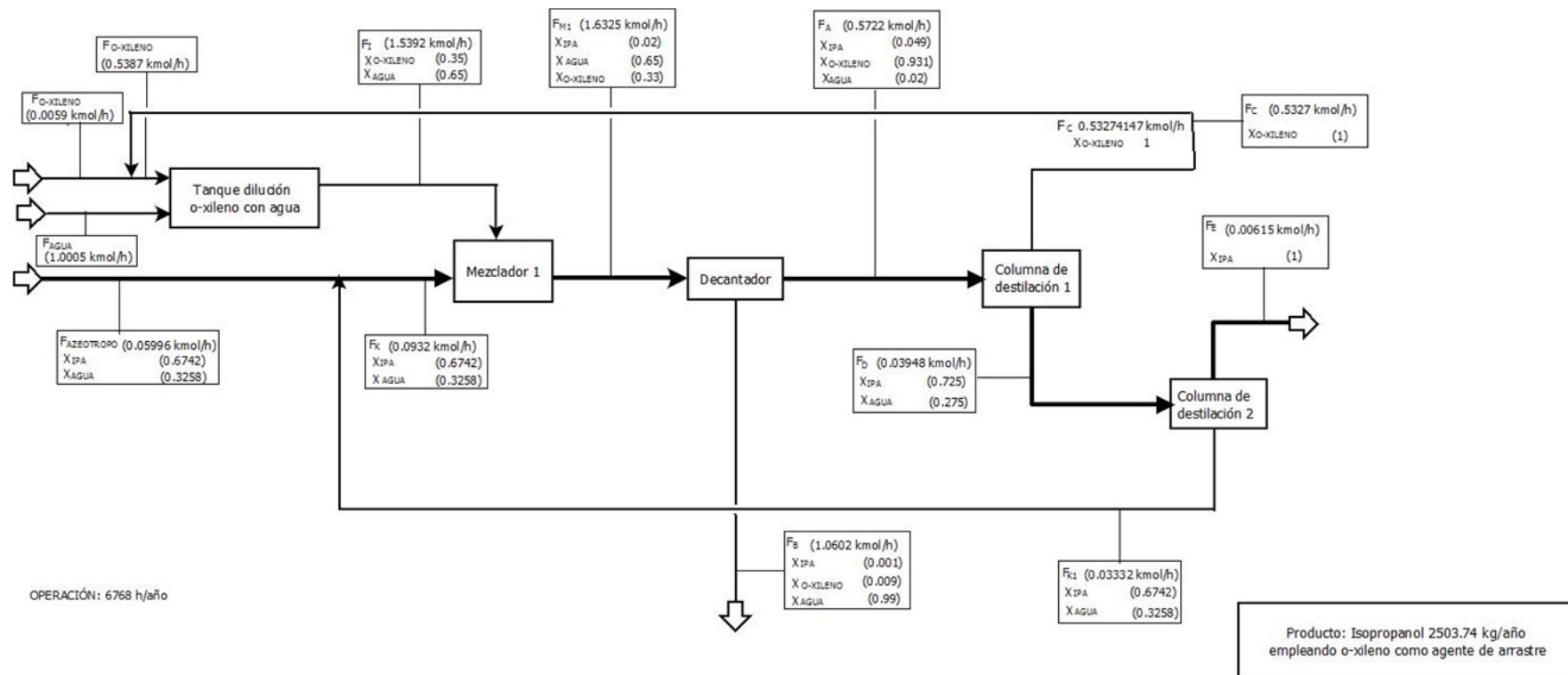


Figura 3.21. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol-agua-o-xileno

3.1.2.5. Separación con n-butanol

En la Figura 3.22 se muestra las curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–n-butanol, en la Tabla 3.8 se presenta la clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–n-butanol y verificación de factibilidad.

En el esquema de separación para el sistema ternario isopropanol–agua–n-butanol inicialmente se mezcla el azeótropo (K) con una dilución de n-butanol en agua (I), lográndose un punto M1 que al decantarse obtiene agua casi pura (B) y una mezcla de los tres componentes (A), que se destila adquiriendo isopropanol puro (C) y una mezcla de n-butanol-agua (D); esta mezcla (D) por destilación, obtiene n-Butanol puro (E) y una mezcla de n-butanol-agua (I1) que es recirculada al punto de dilución (I) como se muestra en la Figura 3.23. En la Figura 3.24 se puede apreciar el diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua–n-butanol.

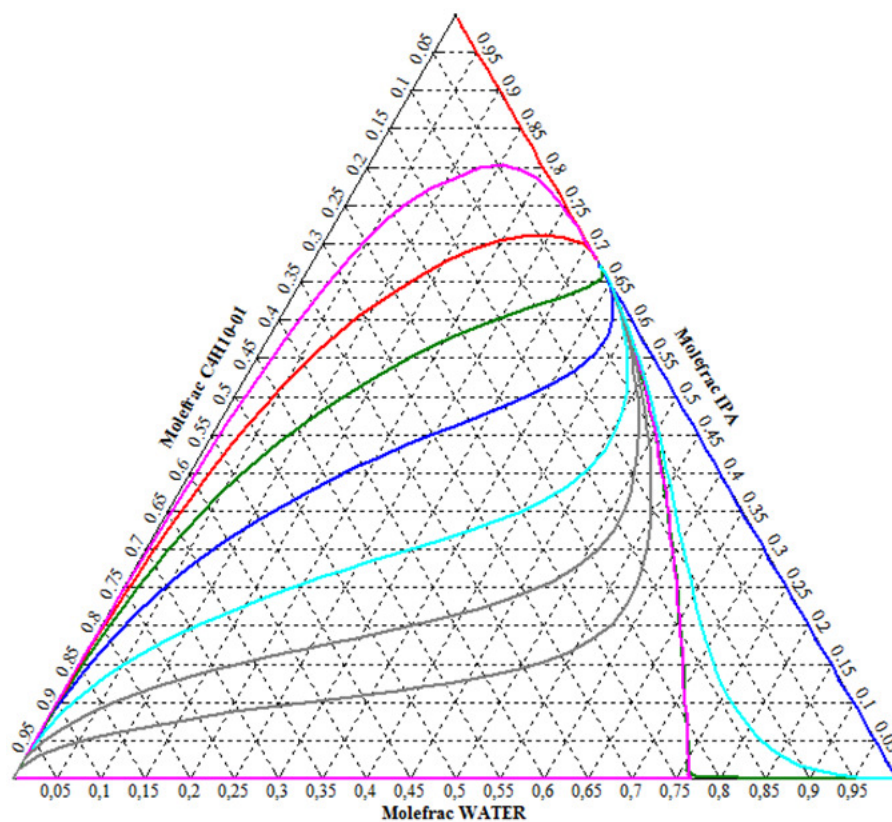


Figura 3.22. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol-agua-n-butanol

Tabla 3.8. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol-agua-n-butanol y verificación de factibilidad.

Agua - Isopropanol - n butanol			
Número de componentes	Componentes	Clasificación	Temperatura (°C)
Un componente	Agua	Nodo Estable	95.2
	Isopropanol	Nodo Estable	77.75
	n Butanol	Nodo Estable	112.9
Dos componentes	Agua	Nodo Inestable	75.91
	Isopropanol		
Dos componentes	Agua	Silla	88.14
	n Butanol		
Factibilidad	4(0 - 0) + 2(1 - 1) + (2 - 1) = 1		

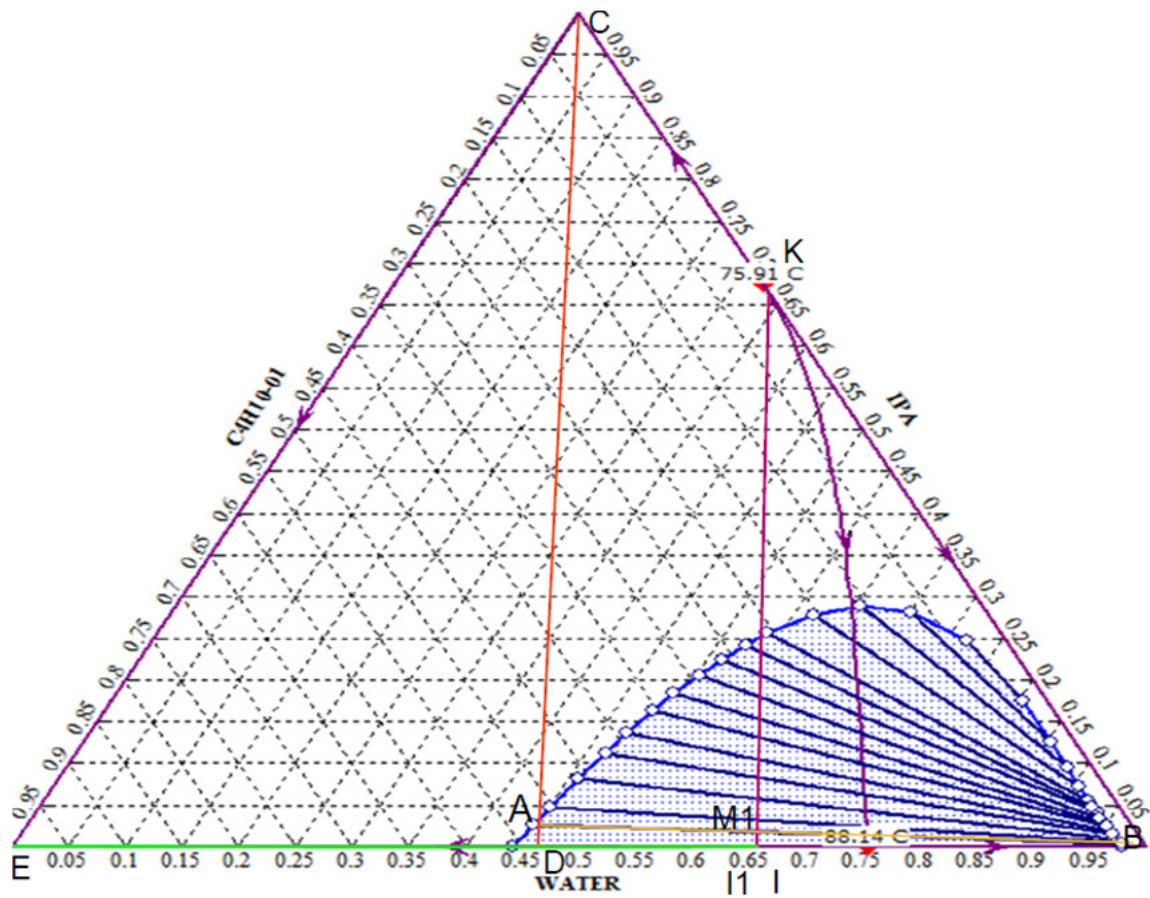


Figura 3.23. Esquema de separación para el sistema ternario isopropanol-agua-n-butanol

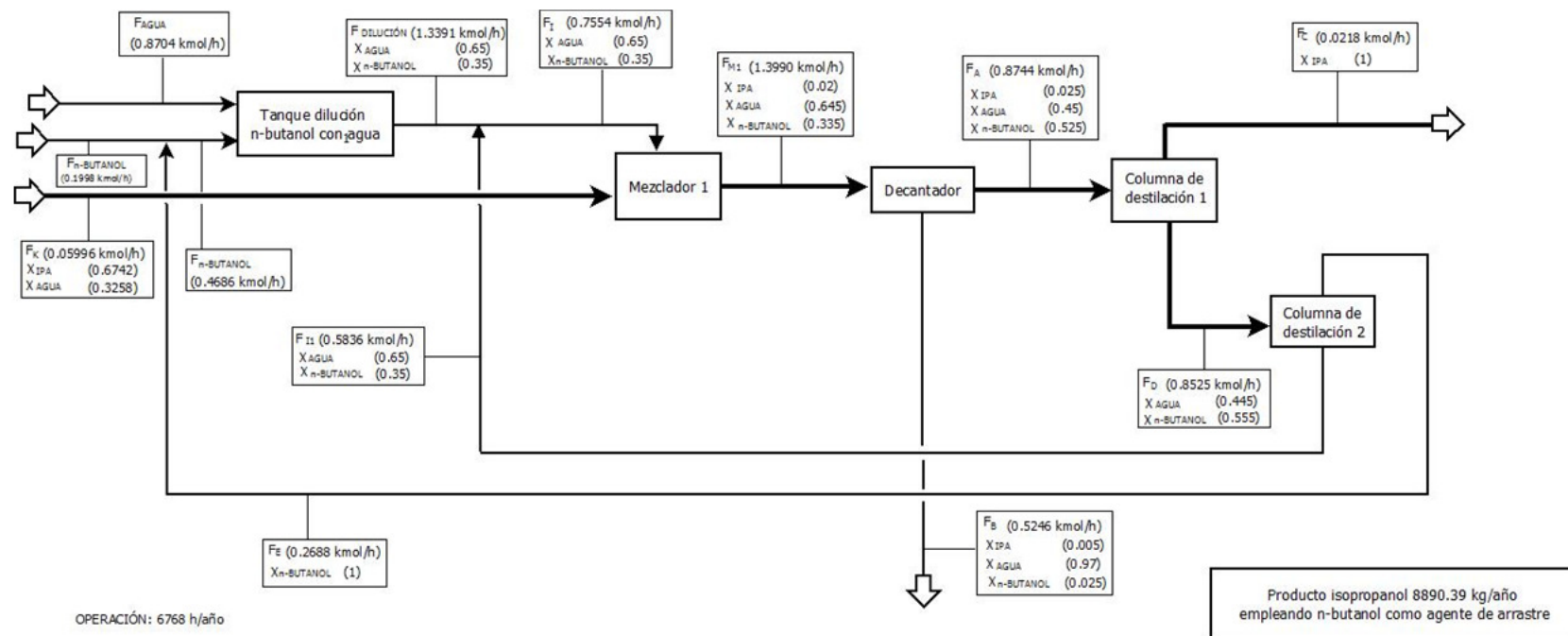


Figura 3.24. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol-agua-n-butanol

3.1.3. Grupo 3: Azeótropo binario sin separación líquido-líquido

De los solventes en estudio, solo el metanol presenta este comportamiento, donde el diagrama cuenta con un único azeótropo binario y no presenta equilibrio líquido-líquido. No existen precedentes de separación de la mezcla IPA-Agua con el empleo de esta sustancia.

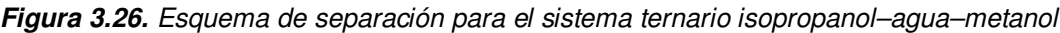
3.1.3.1. Separación con metanol

En la Figura 3.25 se muestra las curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol-agua-metanol, en la Tabla 3.9 se presenta la clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol-agua-metanol y verificación de factibilidad.

En el esquema de separación para el sistema ternario isopropanol-agua-metanol se inicia mezclando el azeótropo (A) con metanol puro (B) obteniendo un punto (M1) que se destila logrando agua pura (D) y un punto (M2) que es destilado para obtener metanol puro (F) y una mezcla de IPA-agua (C) que al destilarse logra IPA puro (E) y una mezcla a composición azeotrópica de IPA-agua (K) que es recirculada al punto azeotrópico (A) como se muestra en la Figura 3.26. en la Figura 3.27 se puede apreciar el diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol-agua-metanol.

Tabla 3.9. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol-agua-metanol y verificación de factibilidad

Agua - Isopropanol - Metanol			
Número de componentes	Componentes	Clasificación	Temperatura (°C)
Un componente	Agua	Nodo Estable	95.2
	Isopropanol	Nodo Estable	77.75
	Metanol	Nodo Inestable	60.17
Dos componentes	Agua	Silla	75.91
	Isopropanol		
Factibilidad	4(0 – 0) + 2(0 – 1) + (3- 0) = 1		



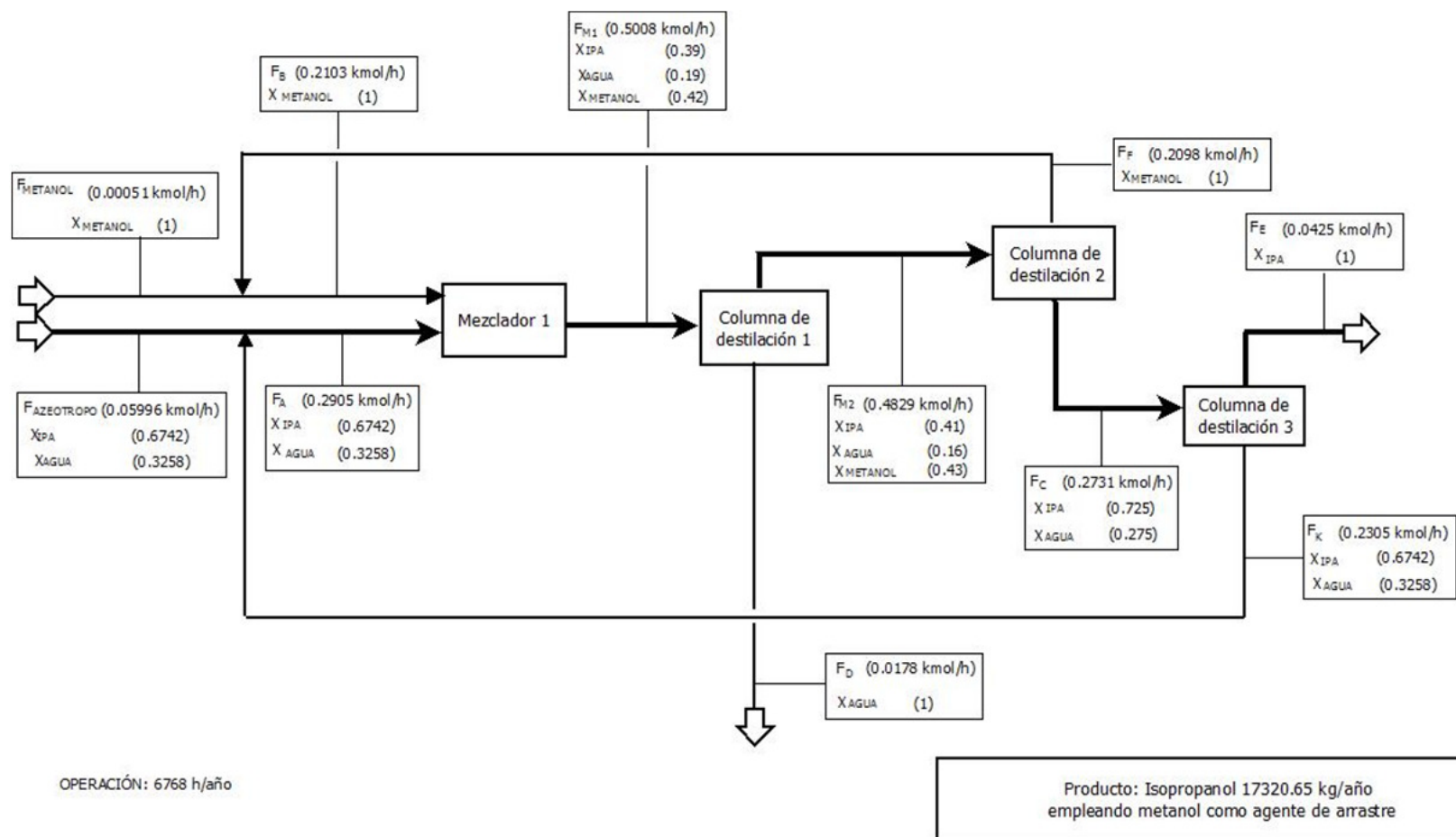


Figura 3.27. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua–metanol

3.1.4. Grupo 4: Solventes sin límite de destilación, aptos para destilación extractiva

Estos diagramas cuentan con un azeótropo binario, no presentan equilibrio líquido-líquido, el solvente no forma un azeótropo con alguno de los componentes de la mezcla, razón por la cual el proceso es apto para modelarse como una destilación extractiva; Además no tienen límite de destilación, debido a que las curvas de residuo tienen la misma forma general (Wankat, 2008). De las sustancias en estudio que presentan dicho comportamiento se tienen, glicerol, monoetilenglicol, dietilenglicol y metoxipropanolacetato. Se cuenta con antecedentes de la viabilidad de la separación de la mezcla IPA-Agua con etilenglicol (Luyben, 2006). De las otras sustancias no se encuentran reportes de separaciones.

3.1.4.1. Glicerol

En la Figura 3.28 se muestra las curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol-agua-glicerol, en la Tabla 3.10 se presenta la clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol-agua-glicerol y verificación de factibilidad, en la Figura 3.29 se observa el esquema de separación para el sistema ternario isopropanol-agua-glicerol y en la Figura 3.30 se puede apreciar el diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol-agua-glicerol.

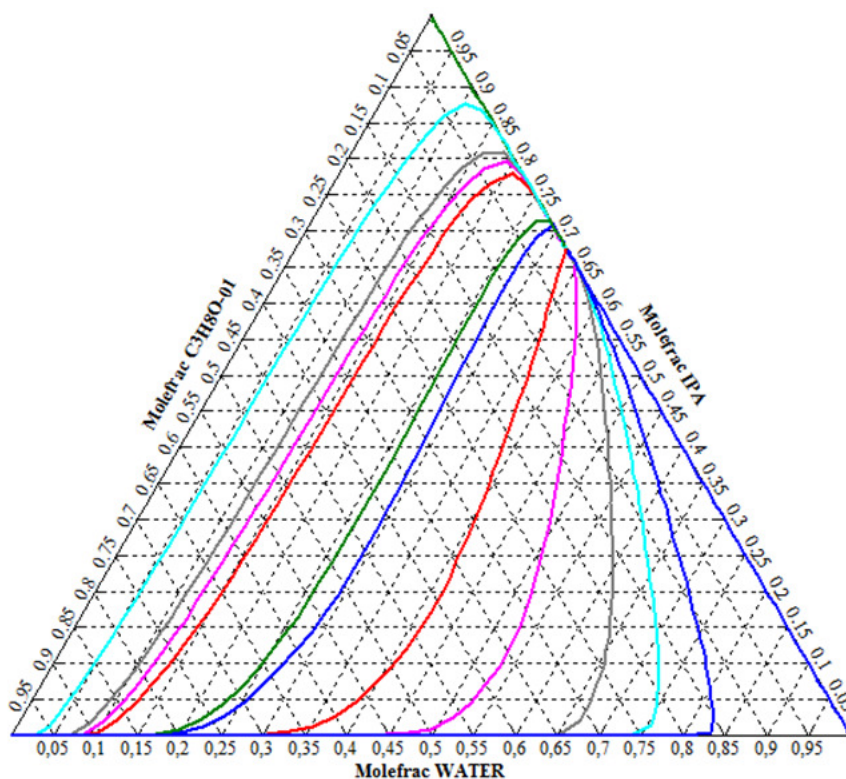


Figura 3.28. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol-agua-glicerol

Tabla 3.10. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–glicerol y verificación de factibilidad

Agua - Isopropanol - Glicerol			
Número de componentes	Componentes	Clasificación	Temperatura (°C)
Un componente	Agua	Silla	95.2
	Isopropanol	Silla	77.75
	Glicerol	NodoEstable	281.12
Dos componentes	Agua	Nodo Inestable	75.91
	Isopropanol		
Factibilidad	4(0 − 0) + 2(1 − 0) + (1- 2) = 1		

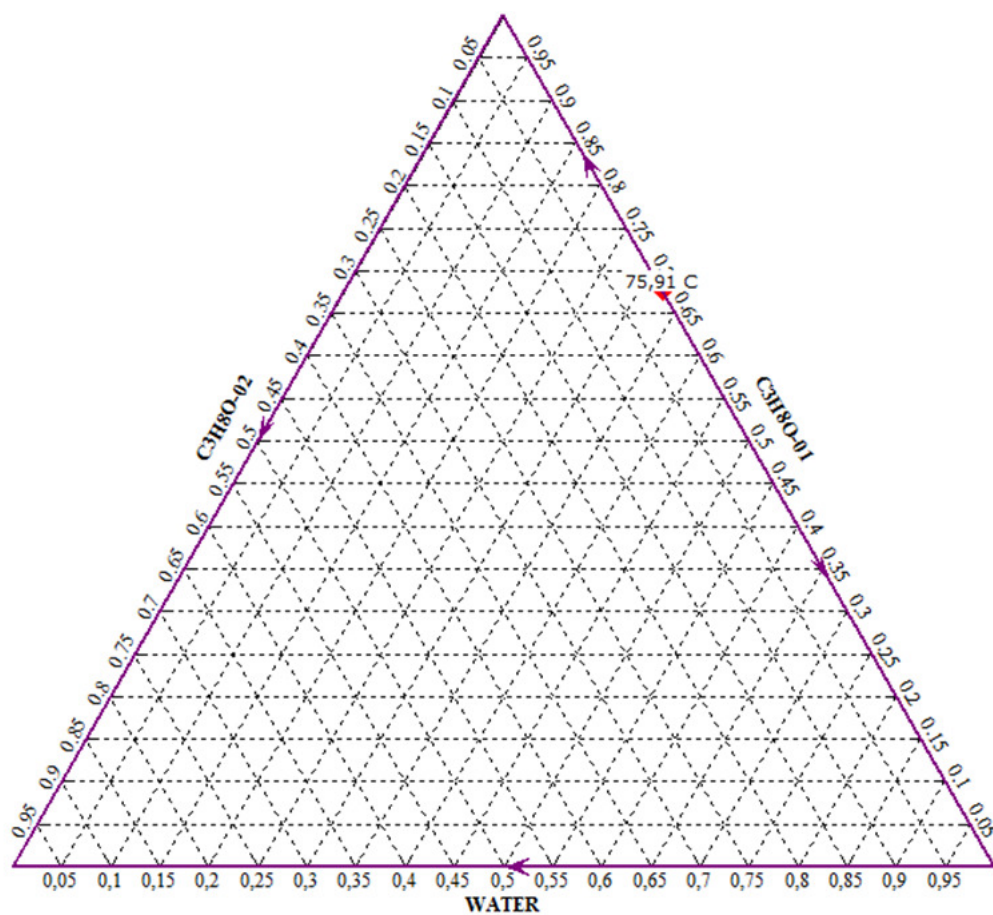


Figura 3.29. Diagrama ternario para el sistema ternario isopropanol–agua–glicerol

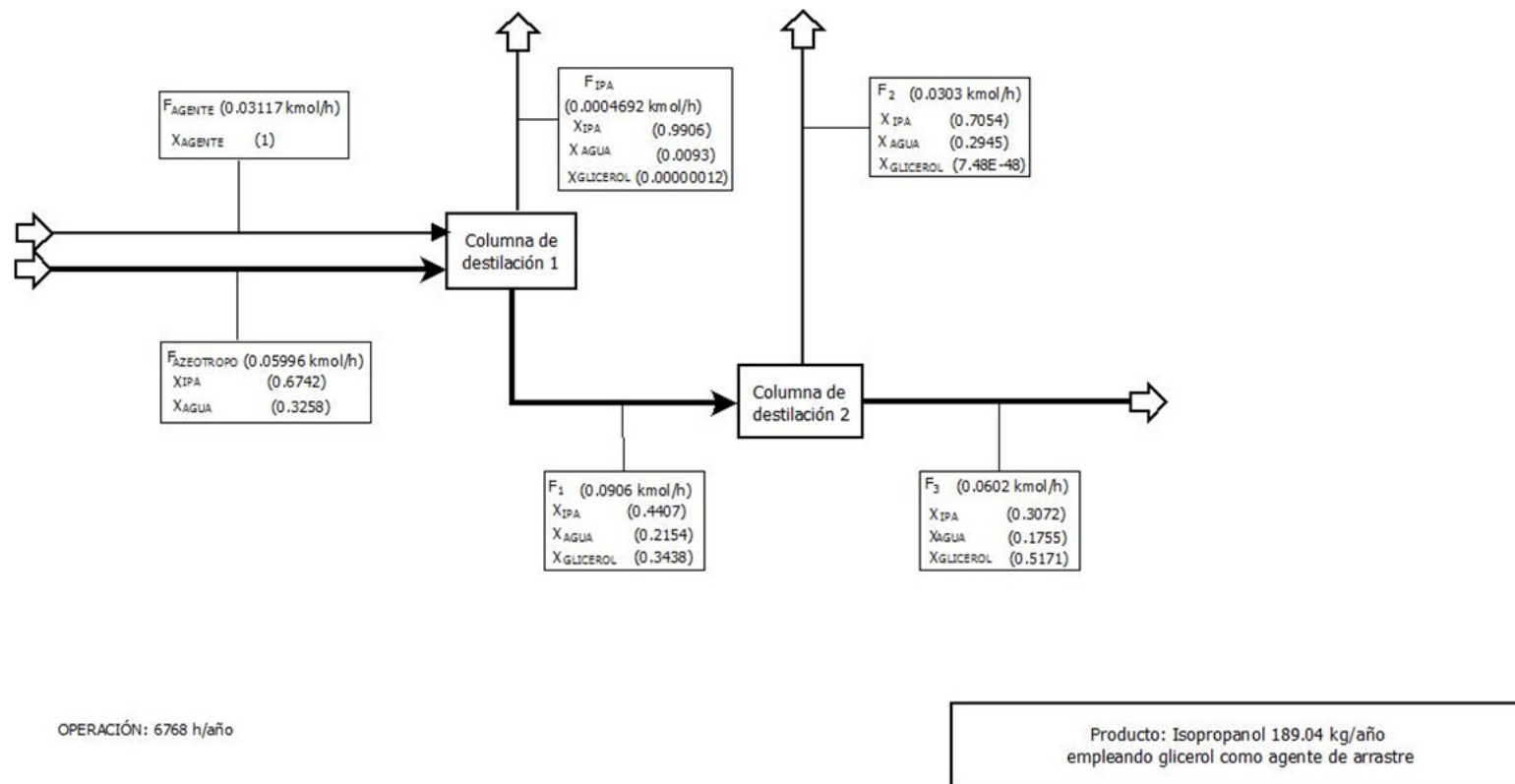


Figura 3.30. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua–glicerol

3.1.4.2. Monoetilenglicol

En la Figura 3.31, se muestra las curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–monoetilenglicol, en la Tabla 3.11 se presenta la clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–monoetilenglicol y verificación de factibilidad, en la Figura 3.32 se observa el esquema de separación para el sistema ternario isopropanol–agua–monoetilenglicol y en la Figura 3.33 se puede apreciar el diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua–monoetilenglicol.

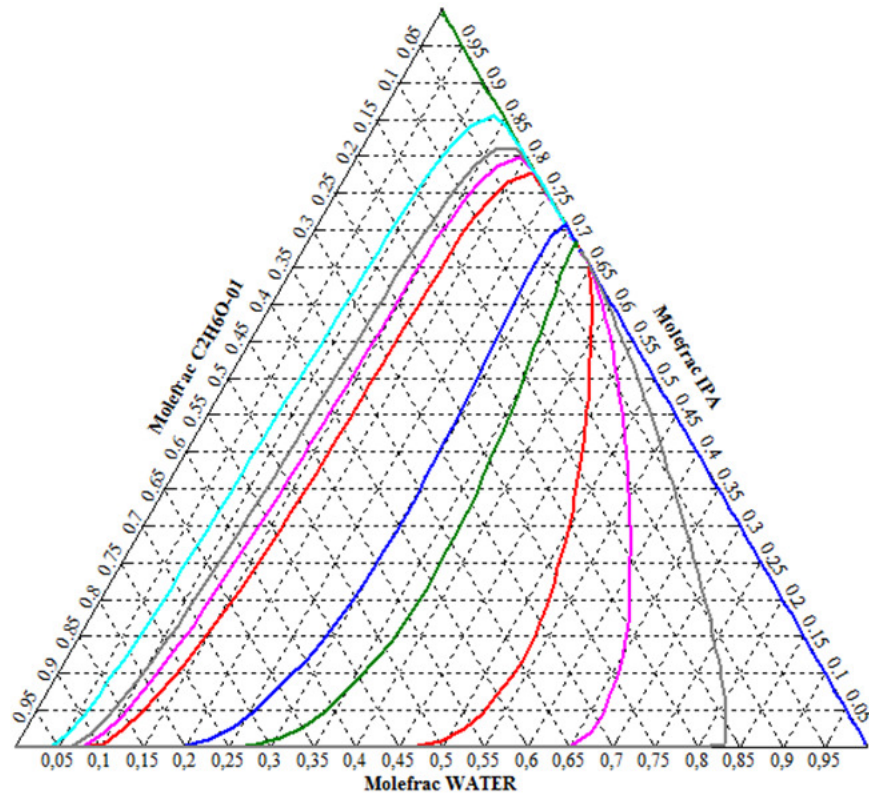


Figura 3.31. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–monoetilenglicol

Tabla 3.11. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–monoetilenglicol y verificación de factibilidad

Agua - Isopropanol - Monoetilenglicol			
Número de componentes	Componentes	Clasificación	Temperatura (°C)
Un componente	Agua	Silla	95.2
	Isopropanol	Silla	77.75
	Monoetilenglicol	Nodo estable	191.34
Dos componentes	Agua	Nodo Inestable	75.91
	Isopropanol		
Factibilidad	4(0 − 0) + 2(1 − 0) + (1 - 2) = 1		

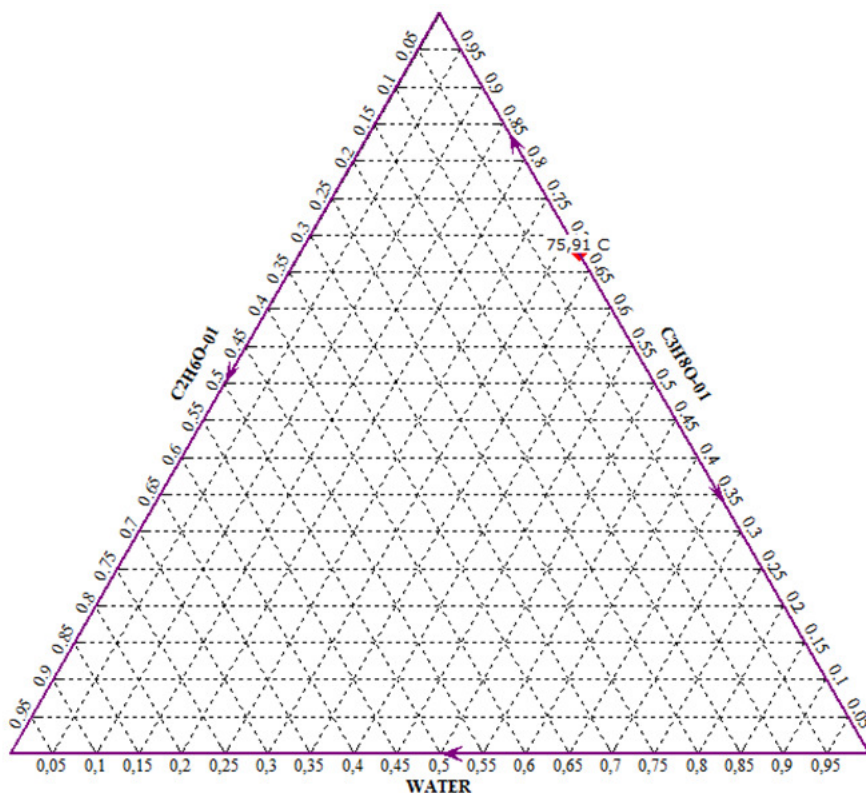


Figura 3.32. Diagrama ternario para el sistema ternario isopropanol–agua–monoetilenglicol

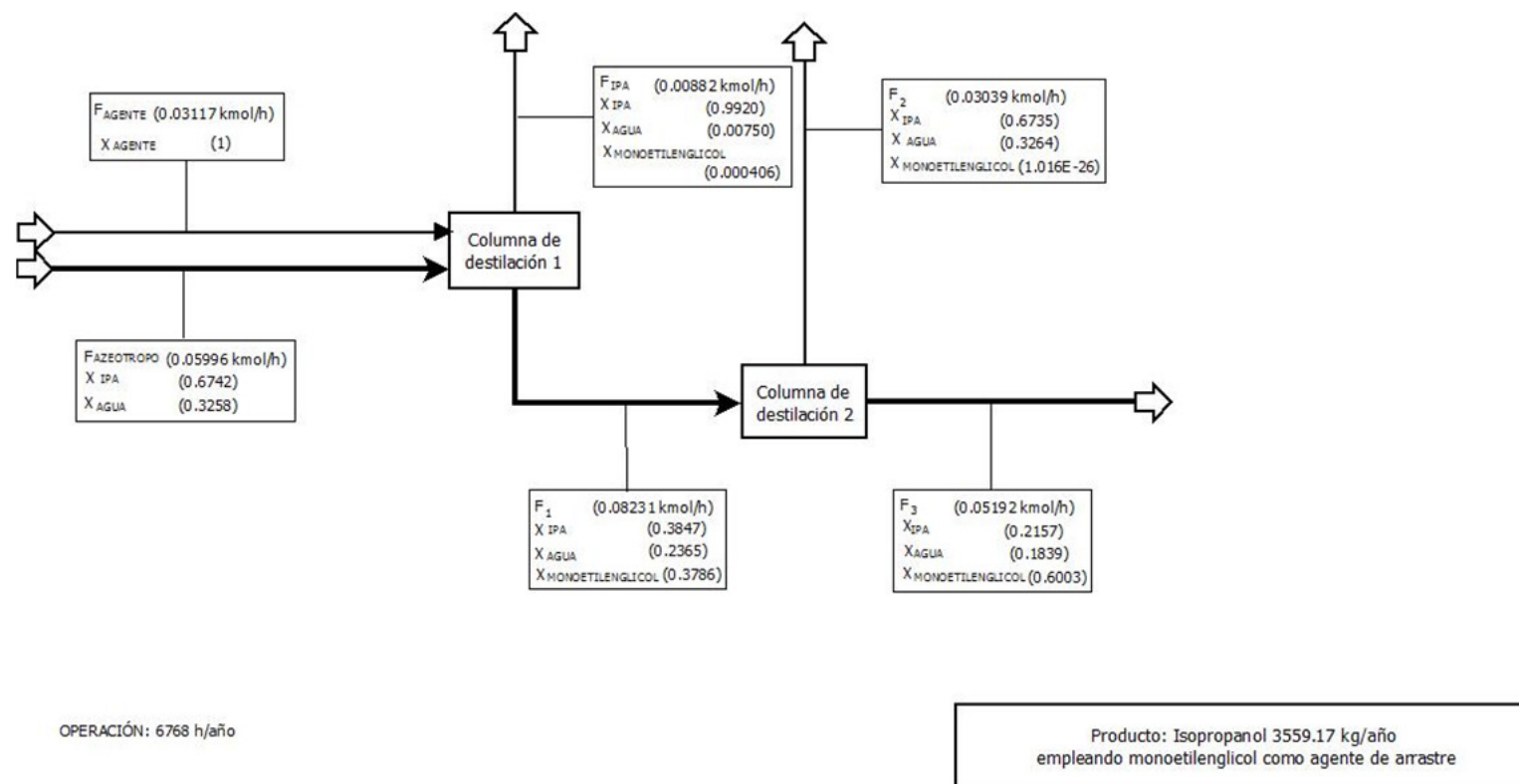


Figura 3.33. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua–monoetilenglicol

3.1.4.3. Dietilenglicol

En la Figura 3.34 se muestra las curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–dietilenglicol, en la Tabla 3.12 se presenta la clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–dietilenglicol y verificación de factibilidad, en la Figura 3.35 se observa el esquema de separación para el sistema ternario isopropanol–agua–dietilenglicol y en la Figura 3.36 se puede apreciar el diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua–dietilenglicol.

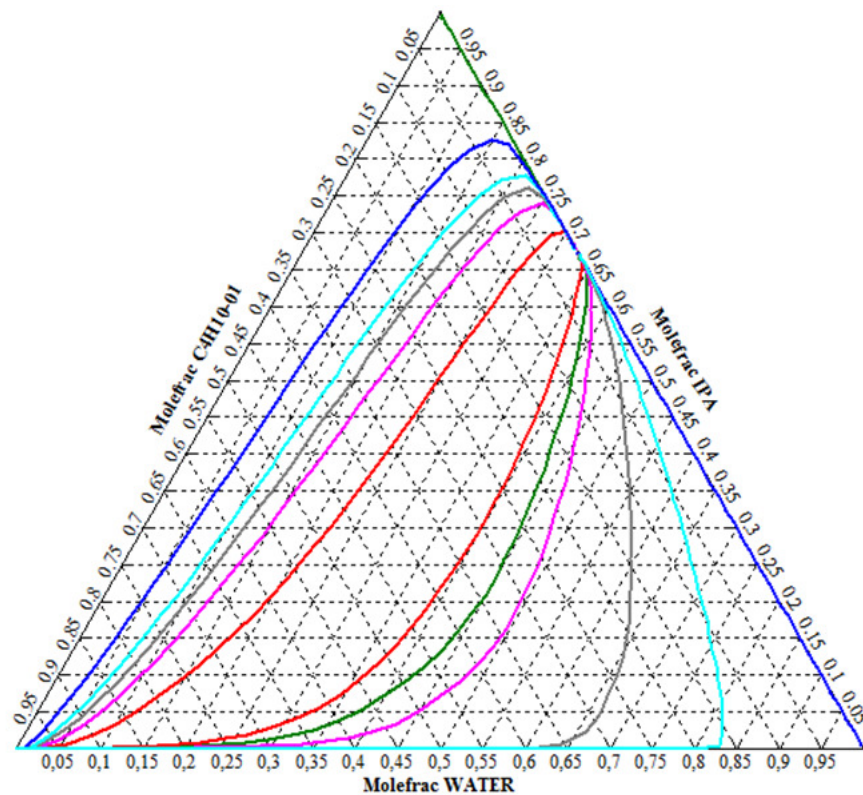


Figura 3.34. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–dietilenglicol

Tabla 3.12. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–dietilenglicol y verificación de factibilidad.

Agua - Isopropanol - Dietilenglicol			
Número de componentes	Componentes	Clasificación	Temperatura (°C)
Un componente	Agua	Silla	95.2
	Isopropanol	Silla	77.75
	Dietilenglicol	Nodo Estable	238.33
Dos componentes	Agua	Nodo Inestable	75.91
	Isopropanol		
Factibilidad	4(0 – 0) + 2(1 – 0) + (1- 2) = 1		

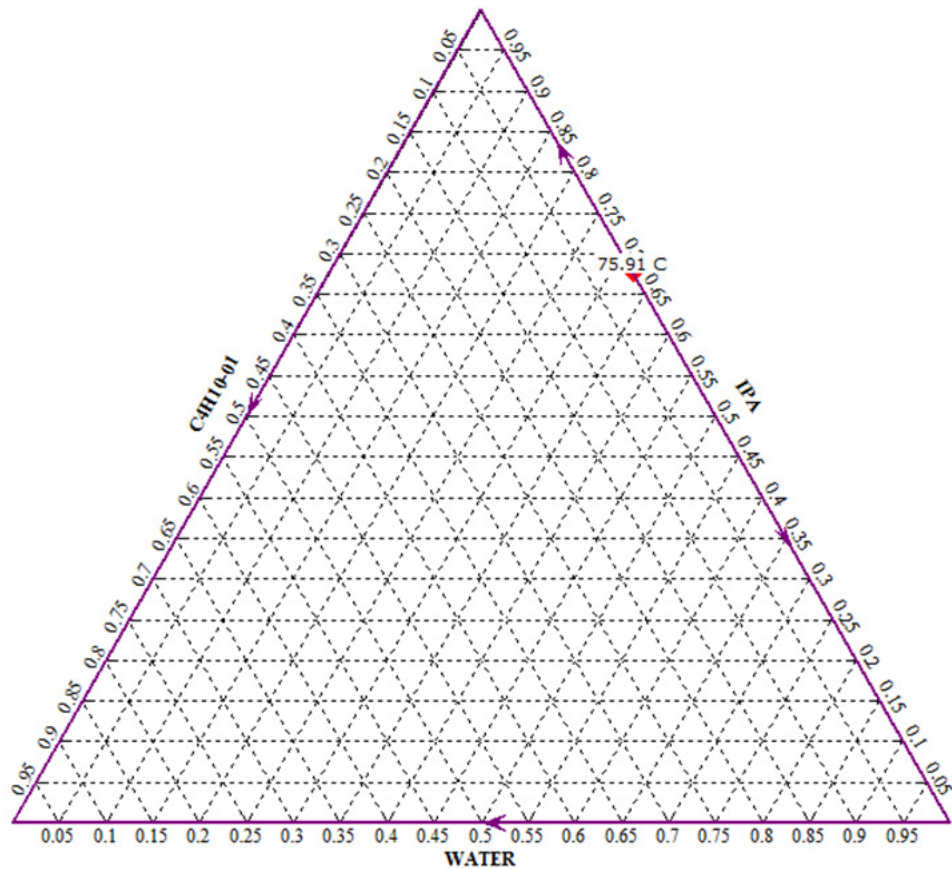


Figura 3.35. Diagrama ternario para el sistema ternario isopropanol–agua–dietilenglicol

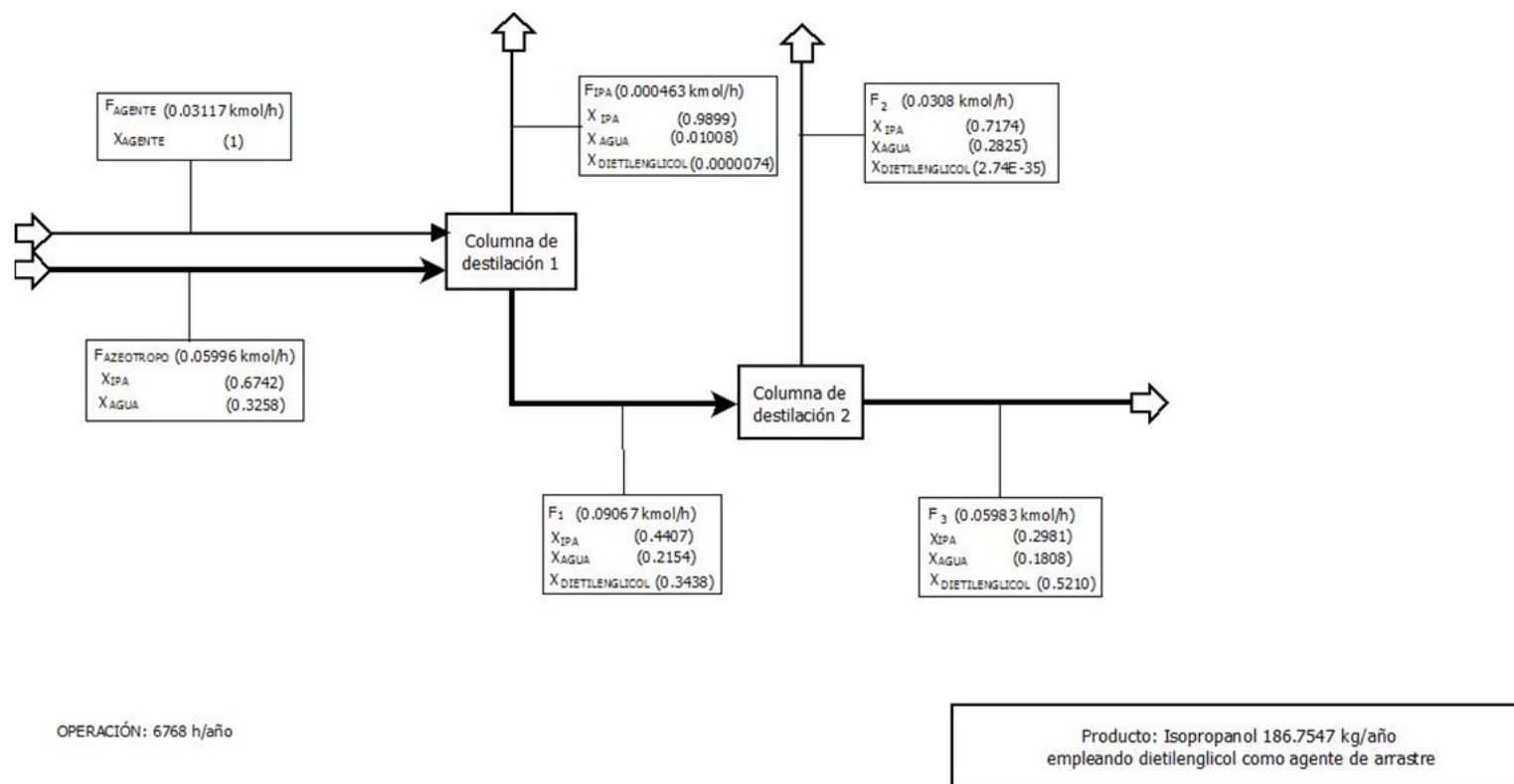


Figura 3.36. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol-agua-dietilenglicol

3.1.4.4. Metoxipropanolacetato

En la Figura 3.37 se muestra las curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–metoxipropanolacetato, en la Tabla 3.13 se presenta la clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–metoxipropanolacetato y verificación de factibilidad, en la Figura 3.38 se observa el esquema de separación para el sistema ternario isopropanol–agua–metoxipropanolacetato y en la Figura 3.39 se puede apreciar el diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua–metoxipropanolacetato.

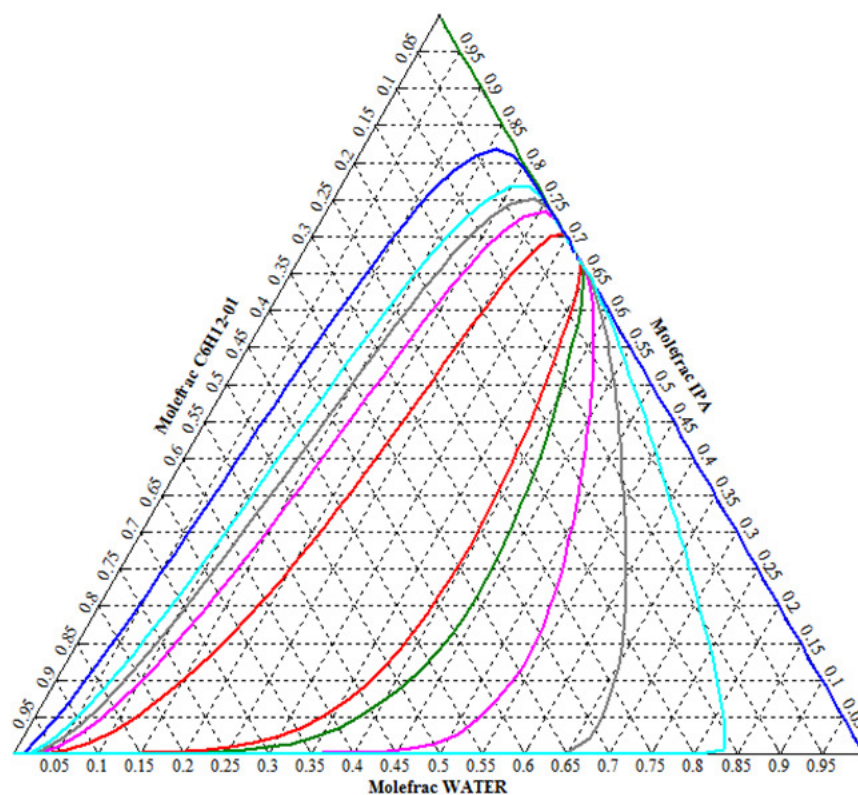


Figura 3.37. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–metoxipropanolacetato

Tabla 3.13. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–metoxipropanolacetato y verificación de factibilidad.

Agua - Isopropanol - Metoxipropanolacetato			
Número de componentes	Componentes	Clasificación	Temperatura (°C)
Un componente	Agua	Silla	95.2
	Isopropanol	Silla	77.75
	Metoxipropanolacetato	NodoEstable	140.06
Dos componentes	Agua	Nodo Inestable	75.91
	Isopropanol		
Factibilidad	4(0 - 0) + 2(1 - 0) + (1- 2) = 1		

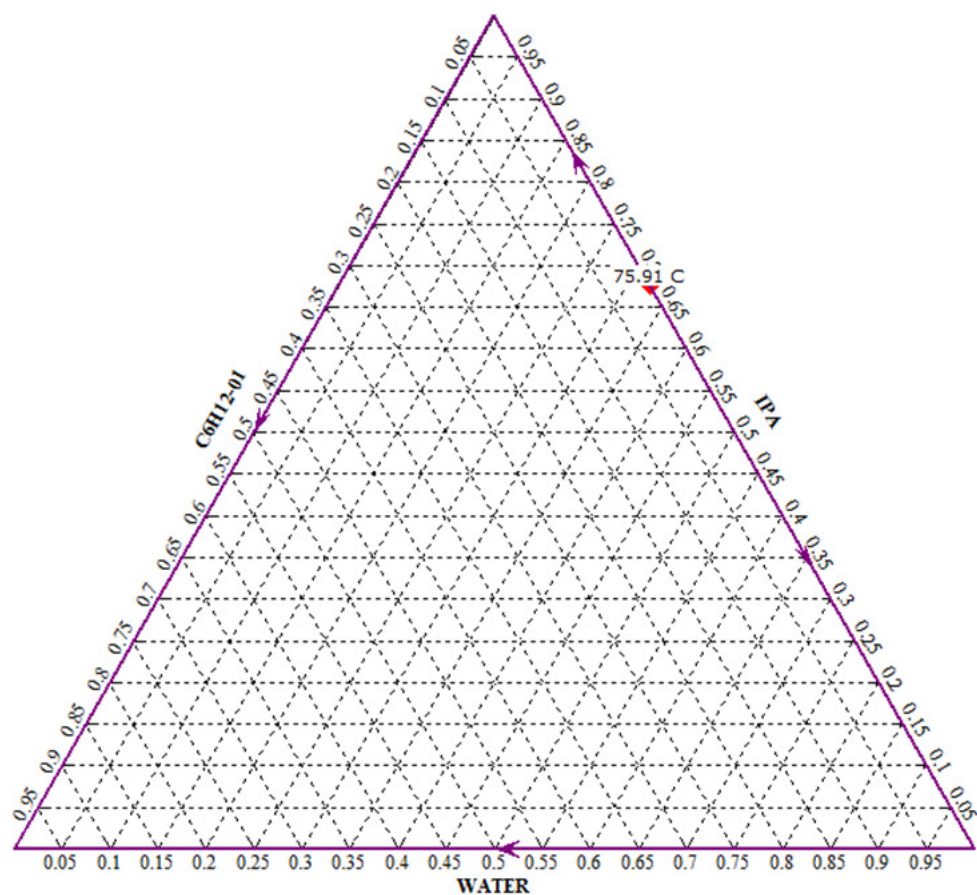


Figura 3.38. Diagrama ternario para el sistema ternario isopropanol–agua–metoxipropanolacetato

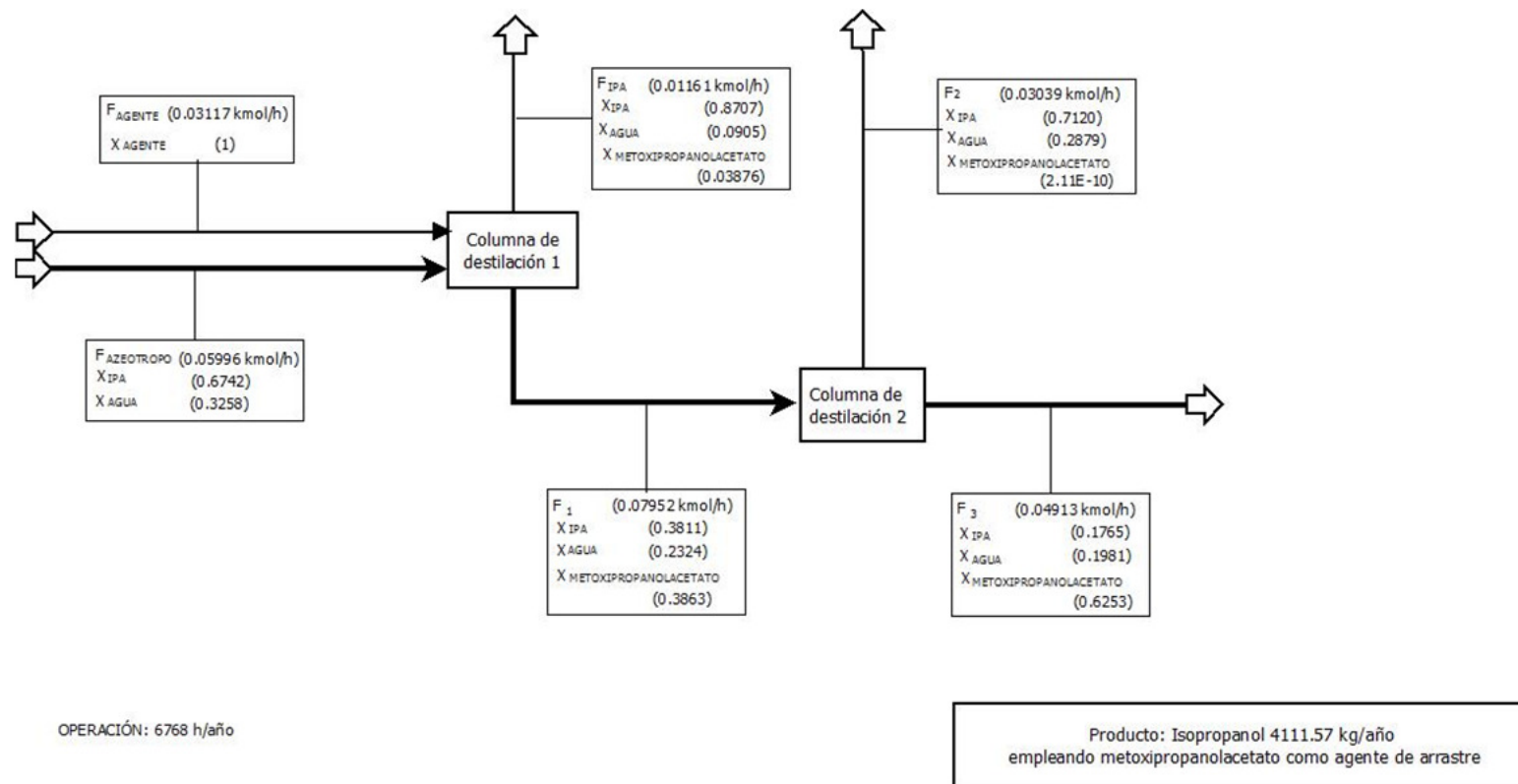


Figura 3.39. Diagrama de bloques para el sistema ternario isopropanol–agua–metoxipropanolacetato

3.1.5. Grupo 5: Solventes no factibles

Estos diagramas presentan dos azeótropos binarios y no cuentan con equilibrio líquido-líquido. Los solventes que presentan este comportamiento son etanol y butil glicol éter. Estas sustancias no son factibles técnicamente y termodinámicamente porque el límite de destilación no permite la obtención de las sustancias deseadas.

3.1.5.1. Etanol

En la Figura 3.40 se muestra las curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol-agua-etanol, en la Tabla 3.14 se presenta la clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol-agua-etanol y verificación de factibilidad, finalmente en la Figura 3.41 se observa el diagrama ternario para el sistema isopropanol-agua-etanol.

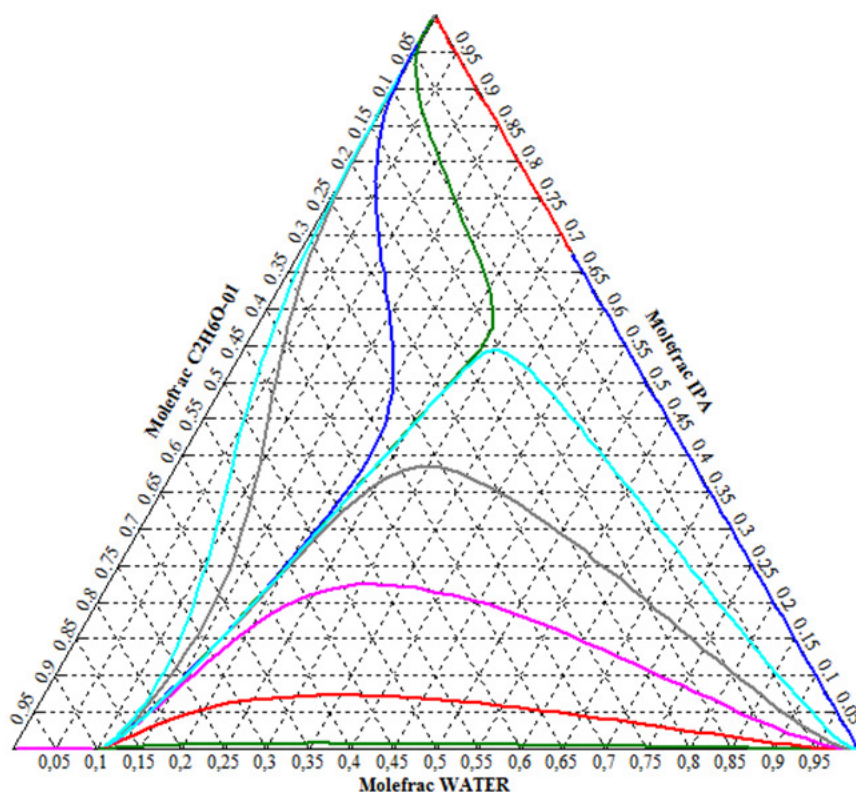


Figura 3.40. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol-agua-etanol

Tabla 3.14. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–etanol y verificación de factibilidad

Agua - Isopropanol - n butanol			
Número de componentes	Componentes	Clasificación	Temperatura (°C)
Un componente	Agua	Nodo Estable	95.2
	Isopropanol	Nodo Estable	77.75
	Etanol	Silla	73.95
Dos componentes	Agua	Silla	75.91
	Isopropanol		
Dos componentes	Agua	Nodo inestable	73.80
	Etanol		
Factibilidad	$4(0 - 0) + 2(1 - 1) + (2 - 1) = 1$		

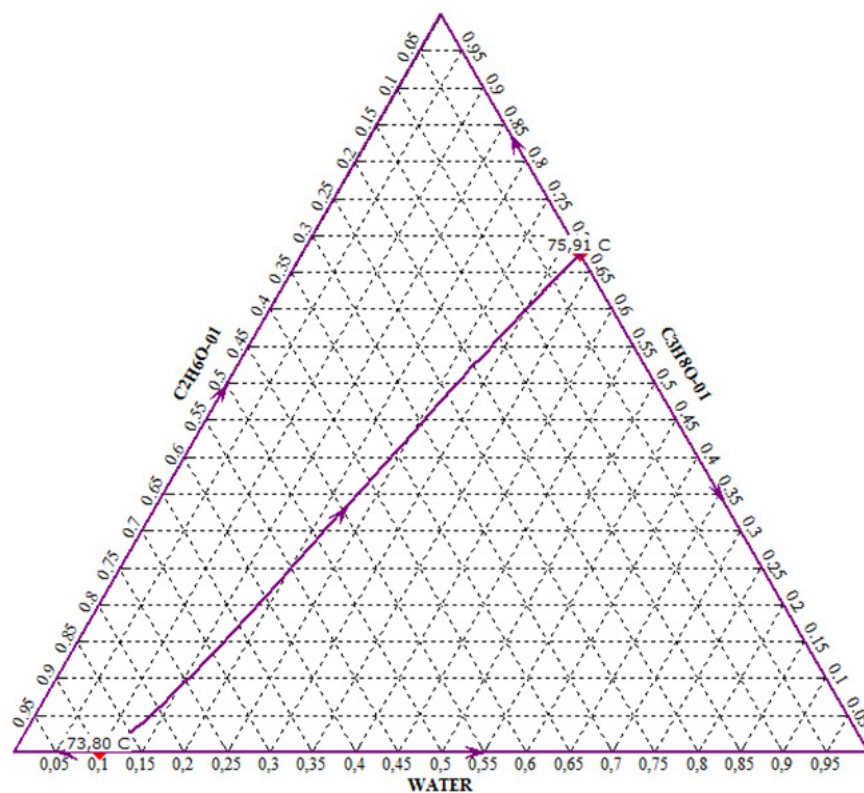


Figura 3.41. Diagrama ternario para el sistema ternario isopropanol–agua–etanol

3.1.5.2. Butil glicol éter

En la Figura 3.42 se muestra las curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–butil glicol éter, en la Tabla 3.15 se presenta la clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–butil glicol éter y verificación de factibilidad, finalmente en la Figura 3.43 se observa el diagrama ternario para el sistema isopropanol–agua–butil glicol éter.

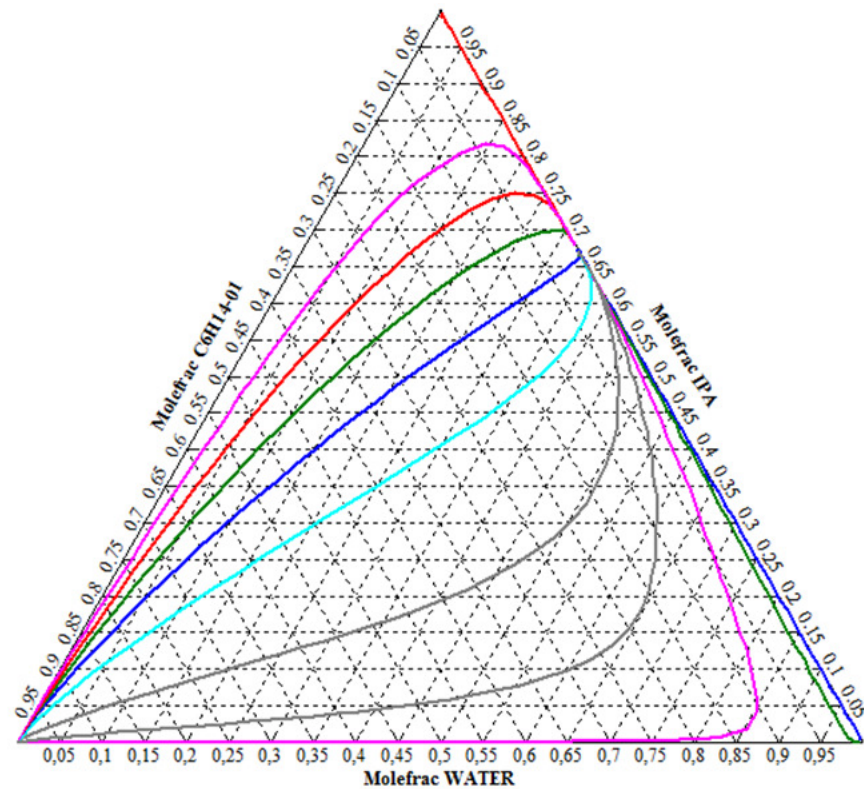


Figura 3.42. Curvas de residuo para el sistema ternario isopropanol–agua–butil glicol éter

Tabla 3.15. Clasificación de sus nodos para el sistema ternario isopropanol–agua–butil glicol éter y verificación de factibilidad.

Agua - Isopropanol - n butanol			
Número de componentes	Componentes	Clasificación	Temperatura (°C)
Un componente	Agua	Nodo Estable	95.2
	Isopropanol	Silla	77.75
	Butil glicol éter	Nodo estable	164.83
Dos componentes	Agua	Nodo inestable	75.91
	Isopropanol		
Dos componentes	Agua	Silla	94.85
	Butil glicol éter		
Factibilidad	$4(0 - 0) + 2(1 - 1) + (2 - 1) = 1$		

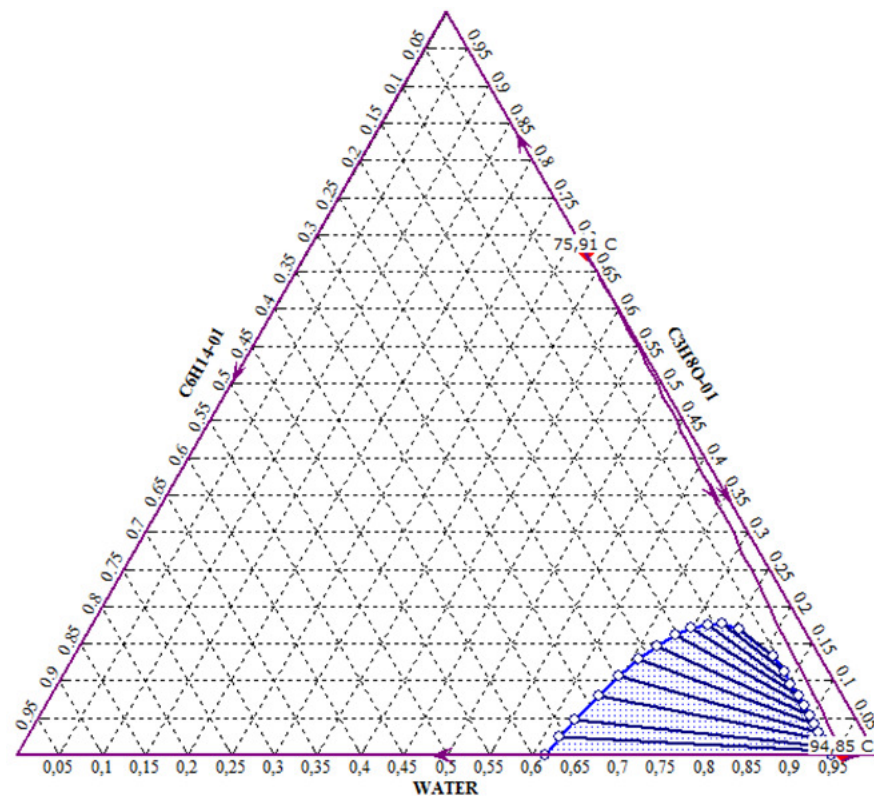


Figura 3.43. Diagrama ternario para el sistema ternario isopropanol–agua–butil glicol éter

CONCLUSIONES

De acuerdo al comportamiento arrojado de los agentes de arrastre en la mezcla en los esquemas de separación, se clasificaron estos en cinco grupos; el primero fue para los diagramas que presentaron azeótropos ternarios y binarios con separación líquido – líquido, el segundo abarcó los diagramas con azeótropos binarios con separación líquido – líquido, el tercero comprendió los diagramas con azeótropos binarios sin separación líquido – líquido, el cuarto fue para los solventes que no presentaron ningún límite de destilación, aptos para destilación extractiva y finalmente el grupo de solventes no factibles.

Los diagramas que no presentaron ningún límite de destilación sirvieron para determinarse el método de trabajo a emplear para ese agente de arrastre en específico, definiéndose así la destilación extractiva. También, se presentaron diagramas termodinámicamente no factibles por lo cual se descartaron estos solventes desde este punto y finalmente para los demás comportamientos se definió trabajar con destilación azeotrópica.

BIBLIOGRAFÍA

- Georgoulaki, A., & Korchinsky, W. J. (1997). Simulation of heterogeneous azeotropic distillation An Improved Algorithm Using Modified UNIFAC Thermodynamic Predictions and the Napthali-Sandholm Matrix Method, 75, 101–115
- Luyben, W. L., & Chien, I-Lung. (2010) Design and control of distillation systems for separating azeotropes (1st ed.). John Wiley & Sons, Inc. New Jersey.
- Luyben, William. L. (2006). Plant wide control of an isopropyl alcohol dehydration process. AIChE Journal, 52(6), 2290–2296. doi:10.1002/aic.10807
- Wang, C. J., Wong, D. S. H., Chien, I. L., Shih, R. F., Liu, W. T., & Tsai, C. S. (1998). Critical Reflux, Parametric Sensitivity, and Hysteresis in Azeotropic Distillation of Isopropyl Alcohol + Water + Cyclohexane. Industrial & Engineering Chemistry Research, 37(7), 2835–2843. doi:10.1021/ie970855t
- Wankat, P. C. (2008). Ingeniería de procesos de separación (2 ed.). Prentice Hall. México

4. ANÁLISIS ECONÓMICO

RESUMEN

En este capítulo, se encuentran los costos preliminares y las consideraciones ambientales de todos los grupos de agentes de arrastre, exceptuando los del grupo # 4, pues al no presentar ningún límite de destilación, no se realizó regla de la palanca y por lo tanto no se cuenta con datos para hacer el análisis. Además, se reporta el costo de la alternativa de tratamiento de la mezcla azeotrópica IPA-agua empleada actualmente por la empresa Invesa S.A, que se tomó como base referencia en la elección económica de los agentes.

4.1. ANÁLISIS ECONÓMICO PRELIMINAR DE ALTERNATIVAS FACTIBLES

Para seleccionar las alternativas mas factibles, se tienen en cuenta un análisis de costos, solo con respecto a los flujos obtenidos mediante los calculos de la regla de la palanca; este analisis involucra el flujo de desechos generados por el proceso, el flujo de IPA que se logra recuperar y el flujo de solvente necesario para esta separación. También, se tuvieron en cuenta las consideraciones ambientales de cada uno de los solventes. Esto se puede observar en la Tabla 4.1 y Tabla 4.2.

El análisis de costos de cada alternativa se realizó tomando como base el costo nulo, el cual corresponde al costo de incineración de los 1800 kg/mes generados en Invesa S.A; por lo tanto, los agentes que daban un costo mayor a este, eran descartados.

Tabla 4.1. Costos totales para cada alternativa propuesta con los diferentes solventes

Alternativa	Flujo solvente	Costo solvente	Flujo desechos	Costo desechos	Flujo IPA (Kg/h)	Costo IPA (\$/Kg)	Costo incineración (\$/Kg)	Costo total
Nula	--	--	--	--	2,5	--	1200	3000
O-xileno	0,636152664	3350	19,97136532	0,5	0,369939278	1070	--	1.745,26
Ciclohexanona	0,145133782	5620	0,545806994	0,5	2,416385349	1070	--	1.769,61
Isobutanol	0,079466567	3020	0,431601573	0,5	2,403869203	1070	--	2.331,94
Metanol	0,016602858	1280	0	0,5	2,559198849	1070	--	2.717,09
Butilacetato	1,288016928	4340	0,399497475	0,5	2,410553014	1070	--	3.010,90
Tolueno	1,99944885	4095	0,14327824	0,5	0,091057982	1070	--	8.090,38
Ciclohexano	3,450072311	4500	0	0,5	1,258739481	1070	--	14.178,47
n-butanol	14,80973544	3270	10,29023327	0,5	1,313592638	1070	--	47.027,44
Etilacetato	17,31514083	3555	3,951934342	0,5	0,5894829	1070	--	60.926,55

Tabla 4.2. Consideraciones ambientales de cada uno de los solventes

Sustancia	Consideraciones
Ciclohexanona (Winkler, 2007)	Inflamable moderado Nocivo e irritante Reactivo leve Sus productos de combustión son el monóxido de carbono y el dióxido de carbono
Ciclohexano (Sintorgan, 2005)	Inflamable a temperaturas normales Moderadamente peligroso para la salud Por evaporación a 20 °C se alcanza rápidamente una concentración nociva en el aire
Dietilenglicol (Winkler, 2007)	Ligeramente inflamable Nocivo Irritante Combustible Reactivo leves Sus productos de combustión son monóxido de carbono y dióxido de carbono
Monoetilenglicol (Merck,2012)	Nocivo por ingestión Toxicidad aguda

	Material combustible
Metanol (Biopack, 2009)	<p>Moderadamente peligroso</p> <p>Vapor dañino</p> <p>Nocivo</p> <p>Inflamable a temperaturas normales</p> <p>En descomposición puede formar dióxido de carbono, monóxido de carbono y formaldehído</p> <p>Toxicidad aguda</p>
Tolueno (IPCS, 2003)	<p>Inflamable a temperaturas normales</p> <p>Peligroso</p> <p>Tóxico</p>
Glicerol (Biopack, 2010)	<p>Baja toxicidad</p> <p>Combustible</p> <p>En descomposición en caso de incendio se puede formar acroleína</p>
Isobutanol (Winkler, 2007)	<p>Inflamable a temperaturas normales</p> <p>Moderadamente peligroso</p> <p>Su producto de combustión son los óxidos de carbono</p> <p>Baja toxicidad</p>
n-butanol (Productos químicos Monterrey S.A., 1999)	<p>Inflamabilidad moderada</p> <p>Moderadamente peligroso</p> <p>Su producto de combustión son los óxidos de carbono</p>
Etilacetato (Honeywell, 2008)	<p>Inflamable a temperaturas normales</p> <p>Moderadamente peligroso</p> <p>Sus productos de combustión son el dióxido de carbono y el monóxido de carbono</p> <p>Toxicidad aguda</p>
n-Butilacetato (Cía. Química y agroquímica	Inflamable a temperaturas normales

Argentina S.A, 2006)	<p>Moderadamente peligroso</p> <p>La descomposición térmica oxidativa puede producir monóxido de carbono tóxico y productos parcialmente oxidados</p>
o-xileno (Biopack, 2009)	<p>Inflamable a temperaturas normales</p> <p>Peligroso</p> <p>Nocivo</p> <p>La descomposición puede producir monóxido de carbono y dióxido de carbono</p>
Metoxipropanolacetato (Merck,2012)	<p>Peligroso</p> <p>Peligro de inflamación bajo calentamiento</p> <p>La descomposición térmica puede generar dióxido de carbono, monóxido de carbono y óxidos de nitrógeno y sulfuro.</p>

Observando la Tabla 4.1, correspondiente al análisis preliminar de costos y tomando como base de referencia el costo nulo, se seleccionaron o-xileno, Ciclohexanona, Isobutanol y metanol, puesto que, estos agentes de arrastre son los que presentan un costo total menor a la alternativa nula de 3000 COP, por lo tanto, emplear este agente proporcionaría desde el punto de vista analizado con respecto a los flujos, un ahorro económico si se compara con el gasto generado por el proceso actual empleado, correspondiente a incineración.

En la Tabla 4.2, se involucran los agentes del grupo 4, ya que, se deseó analizar sus consideraciones ambientales porque se implementarían a nivel de laboratorio y esto proporciona bases para los cuidados que se deben tener en su manipulación. Esta tabla muestra que el comportamiento de los agentes disponibles para este estudio es muy similar, sus productos de descomposición producen óxidos de carbono; por lo tanto esto no fue un criterio muy relevante de selección.

CONCLUSIONES

Los agentes de arrastre de menor costo a la alternativa nula, fueron o-xileno, Ciclohexanona, Isobutanol y metanol respectivamente. Las consideraciones

ambientales no fueron un factor relevante de selección, puesto que estas sustancias presentan comportamiento similar.

Este análisis no involucró los agentes correspondientes al grupo 4, puesto que este análisis se realizó con los flujos encontrados en el camino de destilación seleccionado, sin embargo, posteriormente se encuentra un nuevo análisis de costos con los datos obtenidos por la simulación donde si se reportan estos agentes.

BIBLIOGRAFÍA

Biopack, (2009). Ficha de datos de seguridad Metanol.

Biopack, (2009). Ficha de datos de seguridad o-Xileno.

Biopack, (2010). Ficha de datos de seguridad Glicerol.

Cía. Química y agroquímica Argentina S.A. (2006) Hoja de datos de seguridad. Acetato de isobutilo

Honeywell Burdick & Jackson. (2008). Hoja técnica de seguridad Acetato de etilo.

IPCS, (2003). Fichas internacionales de seguridad química Tolueno.

Merck. (2012). Ficha de datos de seguridad Metoxipropanolacetato.

Merck. (2012). Ficha de datos de seguridad Monoetilenglicol.

Productos químicos Monterrey S.A. (1999) hoja de datos de seguridad de sustancias químicas. Alcohol butílico.

Sintorgan. Reactivos analíticos. (2005). Hoja de seguridad Ciclohexano.

Winkler. (2007). Ficha de seguridad química Ciclohexanona.

Winkler. (2007). Ficha de seguridad química Dietilenglicol.

Winkler. (2007). Ficha de seguridad química Isobutanol.

5. SIMULACIÓN

RESUMEN

En este capítulo, se encuentra la simulación con los solventes seleccionados en el capítulo anterior, los cuales fueron el o-xileno, Ciclohexanona, Isobutanol y metanol, los flujos de entrada empleados en la simulación corresponde a los flujos calculados mediante la regla de la palanca; también se realizó la simulación de los sistemas aptos para destilación extractiva, para estos se usó diez veces más solvente que la alimentación.

5.1. SIMULACIÓN DEL PROCESO DE LAS ALTERNATIVAS FACTIBLES

Se construyó el modelo de destilación azeotrópica en el simulador de procesos Aspen Plus para las alternativas más factibles económicamente, seleccionadas en el capítulo anterior. En la Tabla 5.1 se puede observar el flujo de IPA y la pureza obtenida en la simulación.

Tabla 5.1. Flujo de IPA (Kmol/h) y fracción molar de IPA a partir de la simulación de las alternativas más factibles

Solvente	Flujo de IPA (Kmol/h)	Fracción molar de IPA
Ciclohexanona	0.0396818	0.9987608
Metanol	0.00691309	0.9986372
Isobutanol	0.0389812	0.9981341
Monoetilenglicol	0.00875236	0.9920874
Glicerol	0.000464844	0.9906164
Dietilenglicol	0.000459209	0.9899028
Metoxipropanolacetato	0.0101065	0.8707255
O xileno	0.0391289	0.8602129

Como se puede apreciar en la Tabla 5.1 los solventes con los que se obtuvo un mayor flujo de IPA y una pureza superior al 90% en moles, fueron el metanol, el Isobutanol, la ciclohexanona y el monoetilenglicol. Estos procesos se simularon a 0.84 atm con los modelos termodinámicos ENRTL-RK para el metanol, el isobutanol y la Ciclohexanona, y NRTL en el caso del monoetilenglicol, debido a que son los modelos recomendados para la simulación de sistemas complejos de destilación (Wankat, 2008). Se alimentaron dos corrientes, la primera consiste en

una mezcla a composición azeotrópica con 0.6742 moles de isopropanol y 0.3258 moles agua, con un flujo molar de 0.05996 Kmol/h y otra corriente para el solvente puro. En todas las torres simuladas se variaron los reflujos entre 1 y 20, con aumentos de 0.5 hasta lograr la mayor pureza de IPA.

5.1.1. Metanol

En el caso del metanol, se simularon tres torres de destilación cada una de ellas con un total de 20 platos con la alimentación en el plato 10, con condensador total, fase vapor - líquido de acuerdo a los ejemplos presentados en el apéndice del capítulo 8 del libro ingeniería de procesos de separación de Wankat, estas son las condiciones a las cuales se obtiene una alta pureza del componente que está a composición azeotrópica (Wankat, 2008). En la primera y la segunda torre se trabajó con una relación de reflujo de 1.5 y 2 para la tercera. En la primera se obtuvo agua a una composición molar de 0.9399 con un flujo de 0.0165078 Kmol/h, para la segunda torre se logró obtener metanol a una composición molar de 0.9960 con un flujo de 0.2078324 Kmol/h y finalmente se alcanza una pureza de isopropanol 0.9986 moles con un flujo de 0.006913 Kmol/h; el diagrama de flujo para este proceso se puede observar en la Figura 5.1 con su respectiva Tabla de corrientes para el sistema ternario isopropanol-agua-metanol. Es de aclarar que debido a los flujos tan pequeños no se justifica recircular el metanol obtenido y la mezcla de isopropanol mas agua proveniente de una de las corrientes de la última torre de destilación como se muestra en la Figura 3.27 del diagrama de bloques, ya que el metanol sale a una temperatura de 333.37 K y requiere un enfriamiento hasta los 298.15 K para poder recircularlo, y el isopropanol mas el agua no salen a composición azeotrópica para llevarla a la corriente de alimentación; sin embargo, se realizaron estos procesos pero el sistema no convergió.

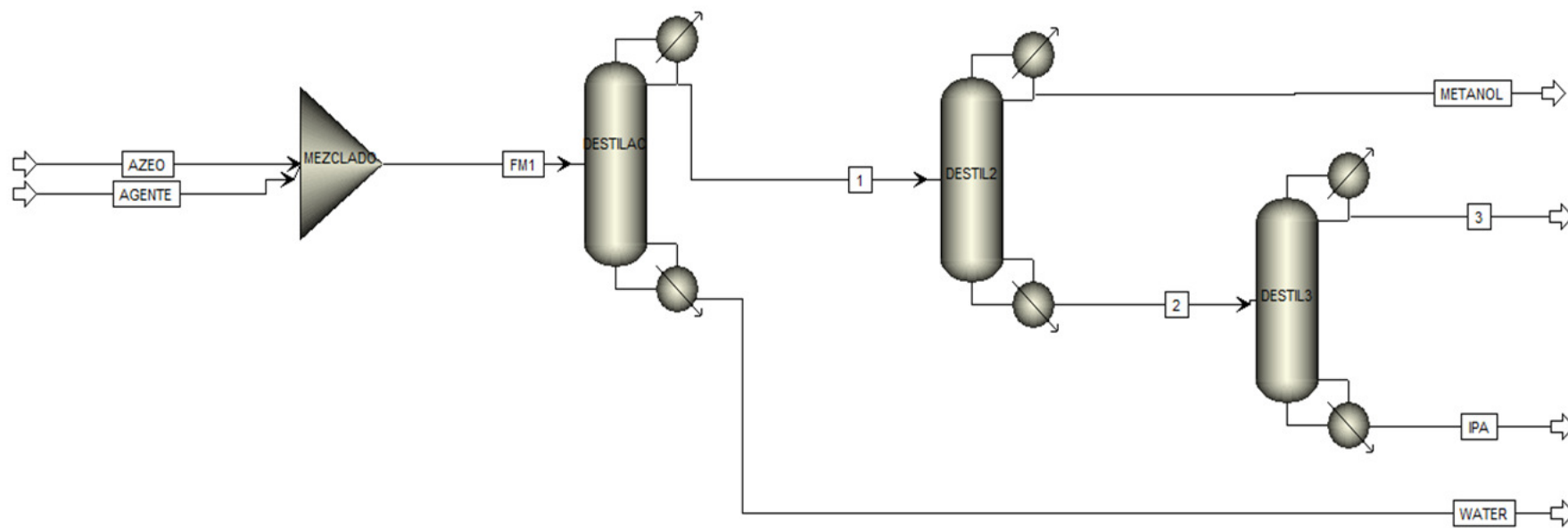


Figura 5.1. Esquema de la simulación para el sistema ternario isopropanol–agua–metanol

Tabla 5.2. Tabla de corrientes para el sistema ternario isopropanol–agua–metanol

Stream ID		AGENTE	AZEO	FM1	WATER	1	METANOL	2	IPA	3
From				MEZCLADO	DESTILAC	DESTILAC	DESTIL2	DESTIL2	DESTIL3	DESTIL3
To		MEZCLADO	MEZCLADO	DESTILAC		DESTIL2		DESTIL3		
Phase		LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID
Substream: MIXED										
Mole Flow	kmol/hr									
IPA		0.0	.0404250	.0404250	5.8431E-4	.0398407	8.1981E-4	.0390209	691.309	.0321078
WATER		0.0	.0195349	.0195349	.0165078	3.0271E-3	2.8449E-7	3.02681E-3	0.90345	301.778
CH4O		.2103715	0.0	.2103715	4.69712E-4	.2099018	.2078324	2.06937E-3	0.0399433	206.898
Mole Frac										
IPA		0.0	.6742000	.1495388	.0332714	.1576168	3.92907E-3	.8844850	.9986372	.8632394
WATER		0.0	.3258000	.0722630	.9399824	.0119757	1.36347E-6	.0686086	130.509	.0811349
CH4O		1.000000	0.0	.7781982	.0267461	.8304075	.9960696	.0469064	5.77004	.0556257
Total Flow	kmol/hr	.2103715	.0599600	.2703315	.0175618	.2527696	.2086525	.0441171	692.253	.0371945
Total Flow	kg/hr	6.740757	2.781307	9.522064	.3475591	9.174505	6.708671	2.465834	.4156242	2050210
Total Flow	l/min	.1416862	.0569788	.1972908	6.26599E-3	.2034460	.1491465	.0559220	951.812	.0464132
Temperature	K	298.1500	298.1500	297.6457	356.7714	335.7646	333.3716	349.2684	3508788	3490350
Pressure	atm	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000
Vapor Frac		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Liquid Frac		1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1000000	1000000
Solid Frac		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Enthalpy	cal/mol	-56989.26	-73541.50	-60660.58	-67152.22	-59057.53	-56171.54	-72382.38	-73605.37	-72152.24
Enthalpy	cal/gm	-1778.571	-1585.423	-1722.154	-3393.149	-1627.112	-1747.042	-1295.019	-1225952	-1308974
Enthalpy	cal/sec	-3330.254	-1224.875	-4555.129	-327.5889	-4146.652	-3255.648	-887.0279	-1415375	-7454643
Entropy	cal/mol-K	-57.54004	-85.64304	-62.61674	-38.13481	-61.16103	-54.96481	-94.19237	-1014379	-9288101
Entropy	cal/gm-K	-1.795760	-1.846310	-1.777690	-1.926922	-1.685066	-1.709511	-1.685229	-1689523	-1685032
Density	mol/cc	.0247461	.0175386	.0228369	.0467121	.0207073	.0233162	.0131483	.0121216	.0133563
Density	gm/cc	.7929208	.8135497	.8044016	.9244590	.7515921	.7496735	.7349016	.7277769	.7362156
Average MW		32.04216	46.38605	35.22366	19.79053	36.29592	32.15237	55.89292	6003938	5512120
Liq Vol 60F	l/min	.1414208	.0572978	.1987186	6.02513E-3	.1926935	.1407568	.0519366	879.651	.0431401

5.1.2. Ciclohexanona

Para la Ciclohexanona, se emplearon dos torres de destilación y un decantador, cada torre con un total de 20 platos con la alimentación en el plato 10, condensador total, fase vapor – líquido libre de agua ya que de acuerdo a los ejemplos presentados en el apéndice del capítulo 8 del libro ingeniería de procesos de separación de Wankat, estas son las condiciones a las cuales se obtiene una alta pureza del componente que esta a composición azeotrópica (Wankat, 2008); cada torre con una relación de reflujo 5 y 1.5 respectivamente. En la primera torre se obtiene isopropanol a una composición molar de 0.9987 con un flujo de 0.03968 Kmol/h, en el decantador se logro separar el agua totalmente pura con un flujo de 0.01909 Kmol/h, finalmente, en la segunda torre se alcanza una pureza para la Ciclohexanona de 0.9260 moles con un flujo de 0.01421 Kmol/h. Se realizaron dos recirculaciones en el proceso provenientes de las dos corrientes de la última torre de destilación como se puede observar en la Figura 5.2, la cual representa el diagrama de flujo de este proceso con su respectiva Tabla de corrientes para el sistema ternario isopropanol–agua–ciclohexanona.

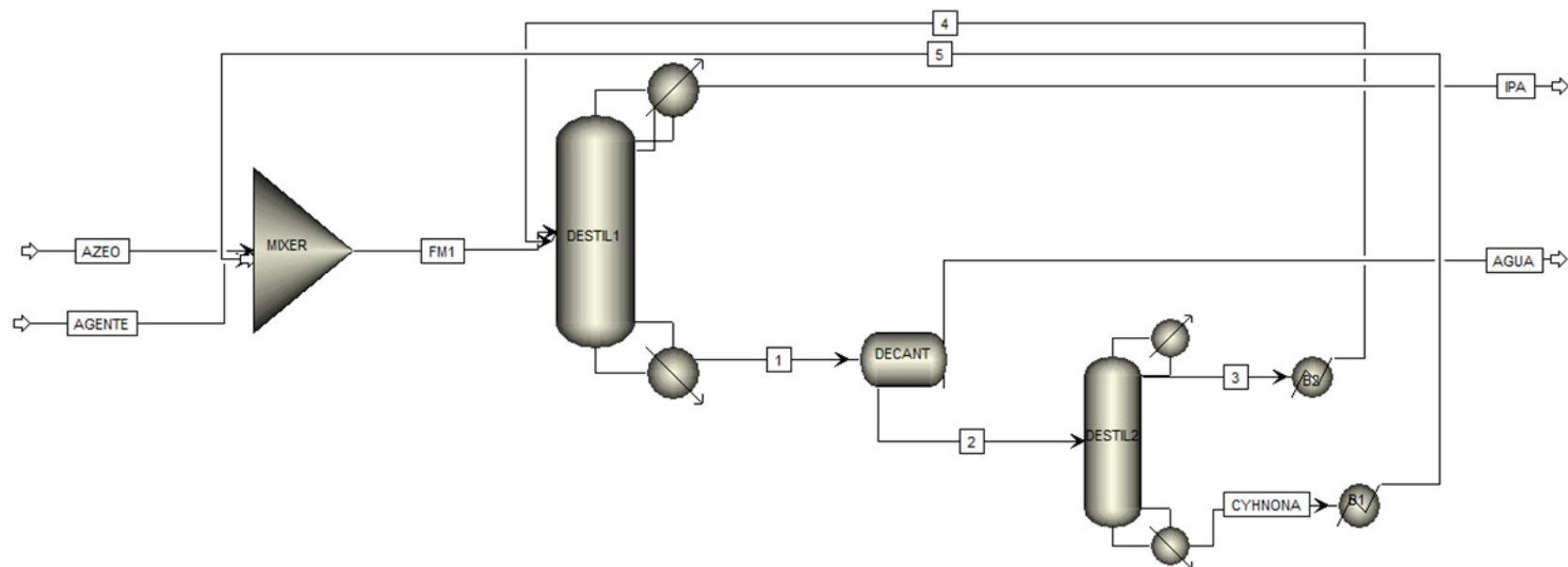


Figura 5.2. Esquema de la simulación para el sistema ternario isopropanol–agua–ciclohexanona

Tabla 5.3. Tabla de corrientes para el sistema ternario isopropanol–agua–ciclohexanona

Stream ID		AZEO	AGENTE	FM1	IPA	1	AGUA	2	CYHNONA	3	4	5
From				MIXER	DESTIL1	DESTIL1	DECANT	DECANT	DESTIL2	DESTIL2	B2	B1
To		MIXER	MIXER	DESTIL1		DECANT		DESTIL2	B1	B2	DESTIL1	
Phase		LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID
Stream: MIXED												
Mole Flow	kmol/hr											
WATER		.0195349	0.0	.0195349	4.92343	.0195010	.0190933	40.7652	39.2377	1.52751	1.52748	39.2377
IPA		.0404250	0.0	.0404250	.0396818	.0147892	0.0	.0147892	74.3171	.0140460	.0140460	74.3171
C6H10-01		0.0	.0142143	.0142143	7.6713E-08	.0142143	0.0	.0142143	.0142143	2.2331E-06	2.233E-06	.0142143
Mole Frac												
WATER		.3258000	0.0	.2633655	123.919	.4020442	1000000	.0138604	.0255621	108.631	108.629	.0255621
IPA		.6742000	0.0	.5450000	.9987608	.3049040	0.0	.5028431	.0484152	.9989137	.9989137	.0484152
C6H10-01		0.0	1000000	.1916345	1.9308E-06	.2930518	0.0	.4832965	.9260226	0.00158808	0.00158804	.9260226
Total Flow	kmol/hr	.0599600	.0142143	.0741743	.0397311	.0485046	.0190933	.0294112	.0153499	.0140613	.0140613	.0153499
Total Flow	kg/hr	2781307	1395066	4176374	2385605	2635157	.3439722	2291185	1446797	.8443878	.8443878	1446797
Total Flow	l/min	.0569788	.0246602	.0814512	.0546358	.0531635	574.919	.0433763	.0289292	.0193385	.0177586	.0257118
Temperature	K	2981500	2981500	2981476	3509121	3670412	2981500	2981500	4067770	3509102	2981476	2981500
Pressure	atm	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000
Vapor Frac		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Liquid Frac		1000000	1000000	1000000	1000000	1000000	1000000	1000000	1000000	1000000	1000000	1000000
Solid Frac		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Enthalpy	cal/mol	-73479.70	-64794.32	-71815.28	-73605.94	-67282.75	-68267.66	-70476.27	-60625.57	-73606.99	-75989.92	-65425.55
Enthalpy	cal/gm	-1584091	-6601911	-1275473	-1225871	-1238456	-3789431	-9046836	-6432123	-1225757	-1265440	-6941381
Enthalpy	cal/sec	-1223845	-2558362	-1479681	-8123457	-9065348	-3620719	-5757770	-2584993	-2875040	-2968116	-2789658
Entropy	cal/mol-K	-8484625	-1346532	-9445712	-1014417	-7918006	-3896565	-1188629	-1166960	-1014540	-1087833	-1303407
Entropy	cal/gm-K	-1829133	-1371985	-1677603	-1689463	-1457446	-2162922	-1525809	-1238097	-1689487	-1811539	-1382861
Density	mol/cc	.0175386	960.682	.0151776	.0121199	.0152061	.0553508	.0113008	884.337	.0121185	.0131967	994.997
Density	gm/cc	.8135497	.9428593	.8545755	.7277285	.8261166	.9971607	.8803510	.8335264	.7277225	.7924685	.9378281
Average MW		4638605	9814480	5630481	6004377	5432793	1801528	7790156	9425437	6005021	6005021	9425437
Liq Vol 60F	l/min	.0572978	.0246645	.0819623	.0504905	.0493431	574.392	.0435992	.0257279	.0178713	.0178713	.0257279

5.1.3. Isobutanol

Para el caso del isobutanol se emplearon para simular las mismas condiciones que la Ciclohexanona, pues son sustancias que presentaron el mismo camino de destilación en el esquema de separación y un comportamiento muy similar en el diagrama ternario. Aquí, se exceptuaron las recirculaciones, debido a que el sistema no simuló cuando se realizaron las recirculaciones. En la primera torre de destilación se obtiene isopropanol a una composición molar de 0.9981 con un flujo de 0.0389812 Kmol/h, en el decantador se logró separar el agua totalmente pura con un flujo de 0.01924 Kmol/h, finalmente en la segunda torre se alcanza una pureza para el isobutanol de 0.999 moles con un flujo de 0.007146 Kmol/h. Igualmente, se ilustra el esquema de simulación en la Figura 5.3 con su respectiva Tabla 5.4 de corrientes.

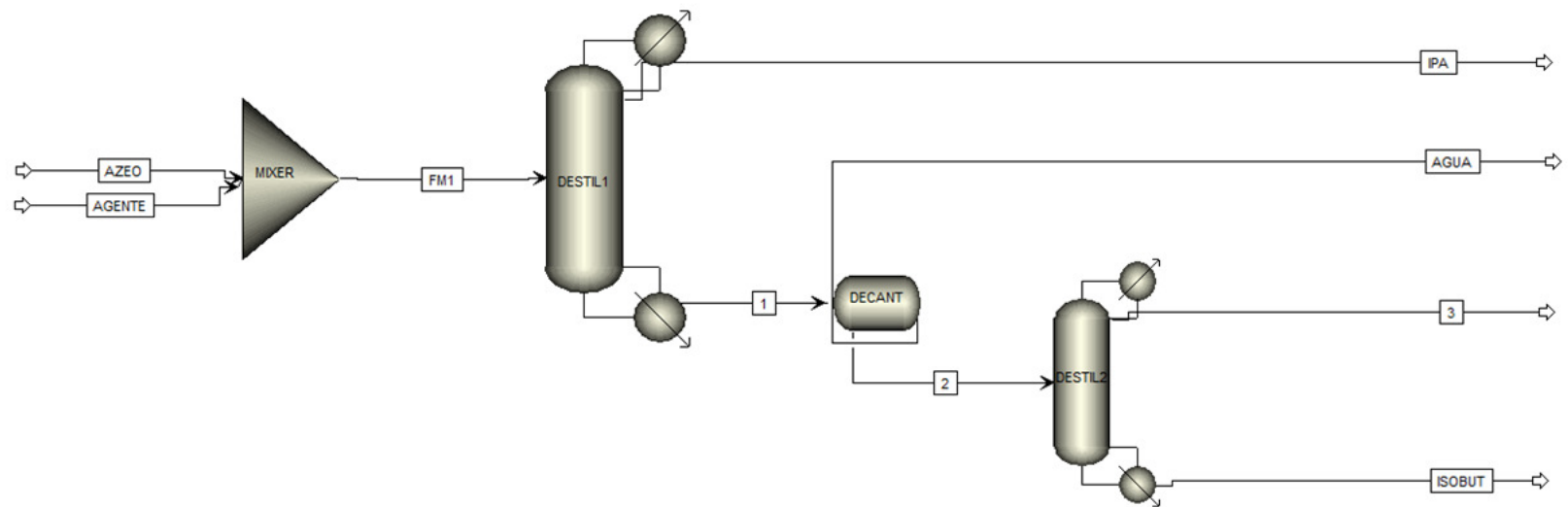


Figura 5.3. Esquema de la simulación para el sistema ternario isopropanol–agua–isobutanol

Tabla 5.4. Tabla de corrientes para el sistema ternario isopropanol–agua–Isobutanol

Stream ID		AZEO	AGENTE	FM1	IPA	1	AGUA	2	ISOBUT	3
From				MIXER	DESTIL1	DESTIL1	DECANT	DECANT	DESTIL2	DESTIL2
To		MIXER	MIXER	DESTIL1		DECANT		DESTIL2		
Phase		LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID
Stream: MIXED										
Mole Flow	kmol/hr									
WATER		0.020	0.000	0.020	0.000	0.019	0.019	0.000	0.000	0.000
IPA		0.040	0.000	0.040	0.039	0.001	0.000	0.001	0.000	0.001
ISOBU-01		0.000	0.014	0.014	0.000	0.014	0.000	0.014	0.002	0.012
Mole Frac										
WATER		0.326	0.000	0.263	0.002	0.554	1.000	0.014	0.001	0.016
IPA		0.674	0.000	0.545	0.998	0.041	0.000	0.091	0.000	0.103
ISOBU-01		0.000	1.000	0.192	0.000	0.405	0.000	0.895	0.999	0.882
Total Flow	kmol/hr	0.060	0.014	0.074	0.039	0.035	0.019	0.016	0.002	0.014
Total Flow	kg/hr	2.781	1.054	3.835	2.344	1.491	0.347	1.144	0.134	1.010
Total Flow	l/min	0.057	0.022	0.079	0.054	0.032	0.006	0.024	0.003	0.023
Temperature	K	298.150	298.150	298.148	350.920	370.117	298.150	298.150	376.150	372.099
Pressure	atm	0.840	0.840	0.840	0.840	0.840	0.840	0.840	0.840	0.840
Vapor	Frac	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Liquid	Frac	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Solid	Frac	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Enthalpy	cal/mol	-73479.700	-79870.590	-74704.420	-73601.990	-70828.330	-68267.660	-79357.630	-75558.000	-75333.980
Enthalpy	cal/gm	-1584.091	-1077.544	-1444.922	-1226.300	-1668.455	-378.943	-1101.125	-1019.946	-1049.074
Enthalpy	cal/sec	-1223.845	-315.364	-1539.209	-798.462	-690.974	-364.920	-349.983	-38.101	-294.250
Entropy	cal/mol-K	-84.846	-135.302	-94.581	-101.395	-71.945	-38.966	-130.816	-122.681	-118.665
Entropy	cal/gm-K	-1.829	-1.825	-1.829	-1.689	-1.695	-2.163	-1.815	-1.656	-1.652
Density	mol/cc	0.018	0.011	0.016	0.012	0.018	0.055	0.011	0.010	0.010
Density	gm/cc	0.814	0.804	0.813	0.728	0.770	0.997	0.804	0.720	0.724
Average	MW	46.386	74.123	51.701	60.020	42.451	18.015	72.070	74.080	71.810
Liq Vol 60F	l/min	0.057	0.022	0.079	0.050	0.030	0.006	0.024	0.003	0.021

5.1.4. Monoetilenglicol

Para el monoetilenglicol se simularon dos torres de destilación, a 1 atm de presión, debido a que el sistema no converge cuando la presión baja a 0.84 atm, a demás de acuerdo al ejemplo de destilación extractiva presentado en el apéndice del capítulo 8 del libro ingeniería de procesos de separación de Wankat (Wankat, 2008) esta es la más apropiada para obtener una alta pureza de la sustancia que está en composición azeotrópica con el agua; igualmente en base a este mismo ejemplo el agente debe de ingresar a la primera torre a una temperatura de 80°C; y ser alimentado en el plato 3, mientras que la esta tiene mezcla de IPA más agua es alimentada en el plato 12; la torre tiene 24 platos, una relación de reflujo de 1.57 y un condensador total; allí se obtuvo IPA a una composición molar de 0.9902 con un flujo de 0.00875 Kmol/h; posteriormente la mezcla proveniente del fondo de la primera torre es alimentada en el plato 12 de una segunda torre, que tiene 24 platos, una relación de reflujo de 15 y un condensador total, allí se obtiene monoetilenglicol a una composición molar de 0.60 con un flujo de 0.0311 Kmol/h; debido a esta composición no es posible recircular el monoetilenglicol a la primera torre. El esquema obtenido por medio de la simulación se muestra en la Figura 5.4 con la Tabla 5.5 de corrientes.

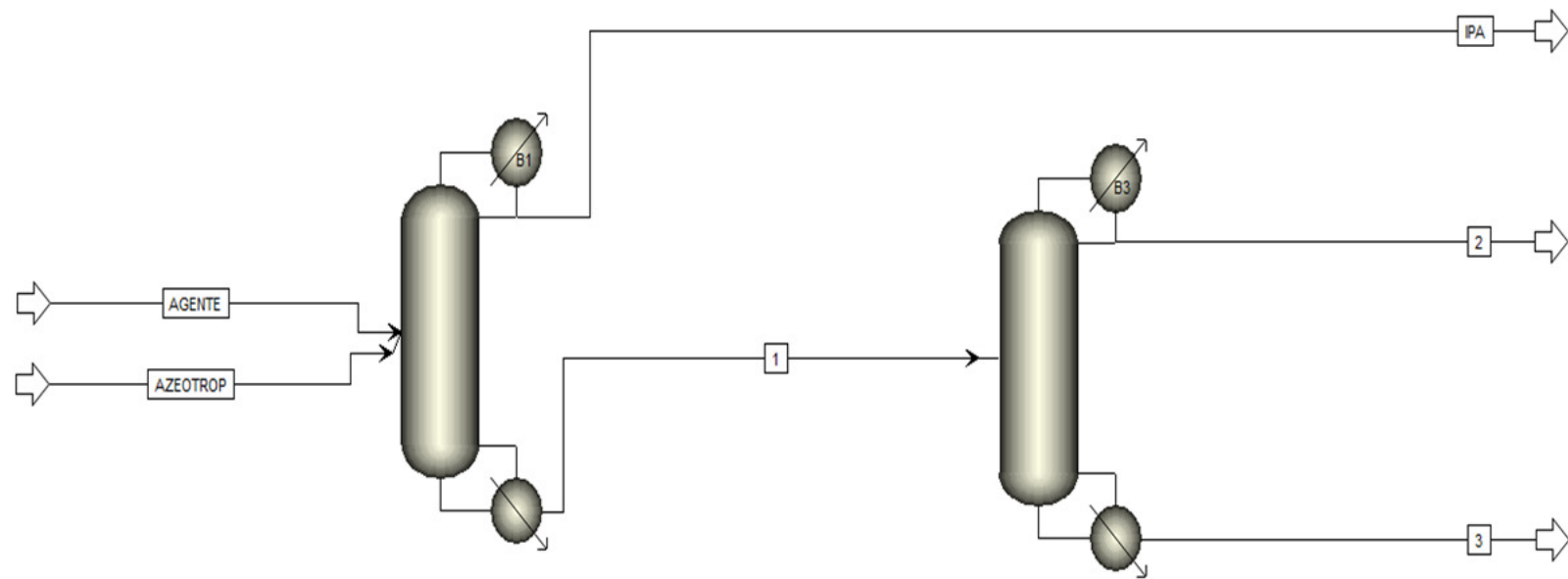


Figura 5.4. Esquema de la simulación para el sistema ternario isopropanol–agua–monoetilenglicol

Tabla 5.5. Tabla de corrientes para el sistema ternario isopropanol–agua–Monoetilenglicol

Stream ID		AGENTE	AZEOTROP	IPA	1	2	3
From				B1	B1	B3	B3
To		B1	B1		B3		
Phase	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	
bstream: MIXED							
Mole Flow	kmol/hr						
WATER		3.12E-01	.0195349	6.62E+00	.0194718	9.92E+02	9.55E+02
IPA		0.0	.0404250	8.75E+02	.0316726	.0204694	.0112032
C2H6O-01		.0311758	0.0	3.59E-01	.0311722	3.09E-24	.0311722
Mole Frac							
WATER		1.00E+01	.3258000	7.51E+02	.2365479	.3264571	.1839269
IPA		0.0	.6742000	.9920874	.3847654	.6735429	.2157533
C2H6O-01		.9999000	0.0	4.07E+01	.3786867	1.02E-22	.6003198
Total Flow	kmol/hr	.0311790	.0599600	8.82E+02	.0823168	.0303906	.0519261
Total Flow	kg/hr	1,935,095	2,781,307	.5273971	4,189,005	1,408,864	2,780,141
Total Flow	l/min	.0301926	.0566124	.0121618	.0795059	.0313093	.0490017
Temperature	K	3,531,500	2,981,500	3,551,150	3,648,938	3,533,307	3,756,471
Pressure	atm	1,000,000	1,000,000	1,000,000	1,000,000	1,000,000	1,000,000
Vapor Frac		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Liquid Frac		1,000,000	1,000,000	1,000,000	1,000,000	1,000,000	1,000,000
Solid Frac		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Enthalpy	cal/mol	-1.08E+09	-73528.54	-73337.11	-85388.44	-71377.21	-92565.85
Enthalpy	cal/gm	-1,732,988	-1,585,144	-1,226,765	-1,677,942	-1,539,682	-1,728,900
Enthalpy	cal/sec	-9,315,264	-1,224,659	-1,797,201	-1,952,474	-6,025,563	-1,335,163
Entropy	cal/mol-K	-1,015,219	-8,559,959	-1,003,262	-8,538,294	-7,900,848	-8,709,165
Entropy	cal/gm-K	-1,635,761	-1,845,374	-1,678,233	-1,677,834	-1,704,297	-1,626,656
Density	mol/cc	.0172111	.0176521	.0120899	.0172559	.0161776	.0176613
Density	gm/cc	1,068,193	.8188152	.7227455	.8781319	.7499688	.9455930
Average MW		6,206,403	4,638,605	5,978,088	5,088,880	4,635,840	5,354,030
Liq Vol 60F	l/min	.0290506	.0572978	.0111563	.0751920	.0290219	.0461701

5.2. Solventes con una pureza inferior al 99.5%

A continuación se muestra a partir de la Figura 5.5 hasta la Figura 5.8 los diagramas para el o-xileno, glicerol, dietilenglicol metoxipropanolacetato respectivamente, con sus correspondientes tablas de corrientes desde la Tabla 5.6 hasta la Tabla 5.9; estos solventes al simularlos no presentaron una pureza de IPA superior al 90%

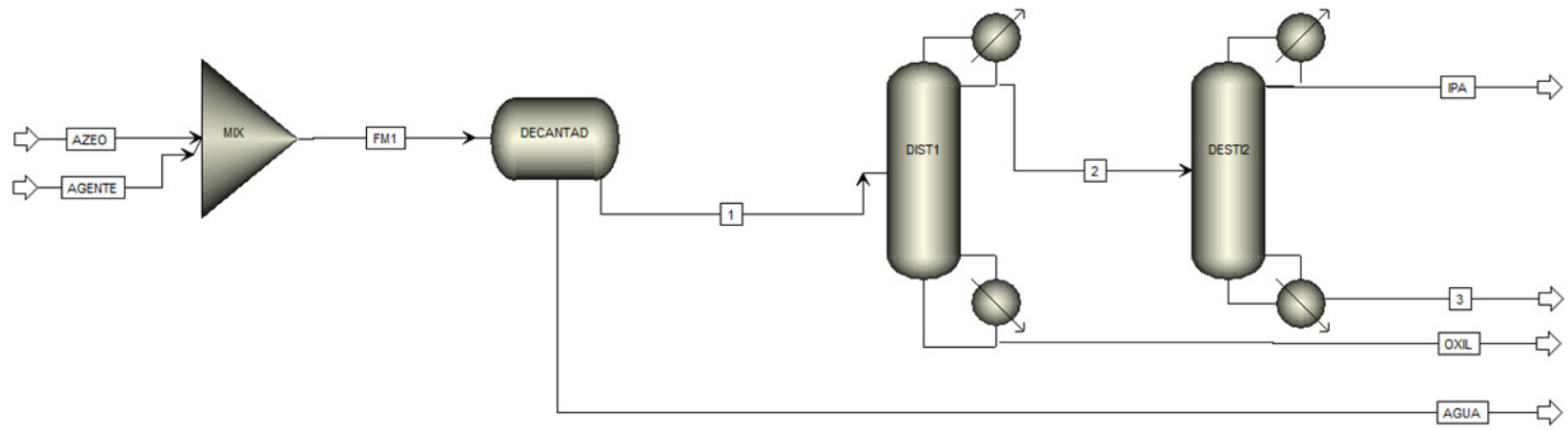


Figura 5.5. Esquema de la simulación para el sistema ternario isopropanol–agua–o-xileno

Tabla 5.6. Tabla de corrientes para el sistema ternario isopropanol-agua-o-xileno

Stream ID		AGENTE	AZEO	FM1	AGUA	1	OXIL	2	IPA	3
From				MIX	DECANTAD	DECANTAD	DIST1	DIST1	DETI2	DETI2
To		MIX	MIX	DECANTAD		DIST1	DETI2			
Phase		LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID
Stream: MIXED										
Mole Flow	kmol/hr									
IPA		0	0.040425	0.040425	0	0.040425	7.2452E-08	0.0404249	0.0391289	0.00129605
WATER		0	0.0195349	0.0195349	0.0131535	0.00638142	4.3047E-06	0.00637711	0.00633859	3.8524E-05
C8H10-01		0.4136	0	0.4136	0	0.4136	0.4082287	0.00537125	0.00199764	0.00535127
Mole Frac										
IPA		0	0.6742	0.0853641	0	0.0878029	1.7748E-07	0.7748205	0.8602129	0.1938496
WATER		0	0.3258	0.0412513	1	0.0138604	1.0545E-05	0.1222294	0.139348	0.00576205
C8H10-01		1	0	0.8733846	0	0.8983367	0.9999893	0.1029501	0.00043916	0.8003884
Total Flow	kmol/hr	0.4136	0.05996	0.47356	0.0131535	0.4604064	0.4082331	0.0521733	0.0454874	0.00668585
Total Flow	kg/hr	43.91084	2.781307	46.69214	0.2369649	46.45518	43.34067	3114512	2.4678	0.6467119
Total Flow	l/min	0.8334541	0.0569788	0.8874714	0.00396066	0.8835094	0.9317809	0.0685772	0.0557241	0.0135999
Temperature	K	298.15	298.15	298.1516	298.15	298.15	410.9739	352.066	349.5688	383.7723
Pressure	atm	0.84	0.84	0.84	0.84	0.84	0.84	0.84	0.84	0.84
Vapor Frac		0	0	0	0	0	0	0	0	0
Liquid Frac		1	1	1	1	1	1	1	1	1
Solid Frac		0	0	0	0	0	0	0	0	0
Enthalpy	cal/mol	-5828.22	-73478.82	-14393.83	-68267.66	-12854.75	-200.4607	-65516.19	-72711.58	-15680.13
Enthalpy	cal/gm	-54.89651	-1584.072	-145.9848	-3789.431	-127.4005	-1.888174	-1097.506	-1340.249	-162.1045
Enthalpy	cal/sec	-669.5977	-1223.831	-1893.428	-249.4339	-1644.003	-22.73186	-949.4992	-918.7406	-29.1208
Entropy	cal/mol-K	-107.877	-86.01931	-104.4092	-38.96565	-106.2791	-91.99745	-91.99057	-91.90611	-94.58651
Entropy	cal/gm-K	-1.016103	-1.854422	-1.058937	-2.162922	-1.053308	-0.8665397	-1.540997	-1.69405	-0.9778554
Density	mol/cc	0.0082708	0.0175386	0.00889343	0.0553508	868.518	0.00730202	0.0126799	0.0136049	0.00819347
Density	gm/cc	0.8780894	0.8135497	0.876876	0.9971607	0.8763381	0.7752299	0.756935	0.7380997	0.7925421
Average MW		106.1674	46.38605	98.59816	18.01528	100.9004	106.1665	59.69549	54.2523	96.72853
Liq Vol 60F	l/min	0.8290198	0.0572978	0.8863176	0.00395703	0.8823606	0.8182551	0.0641055	0.0517192	0.123862

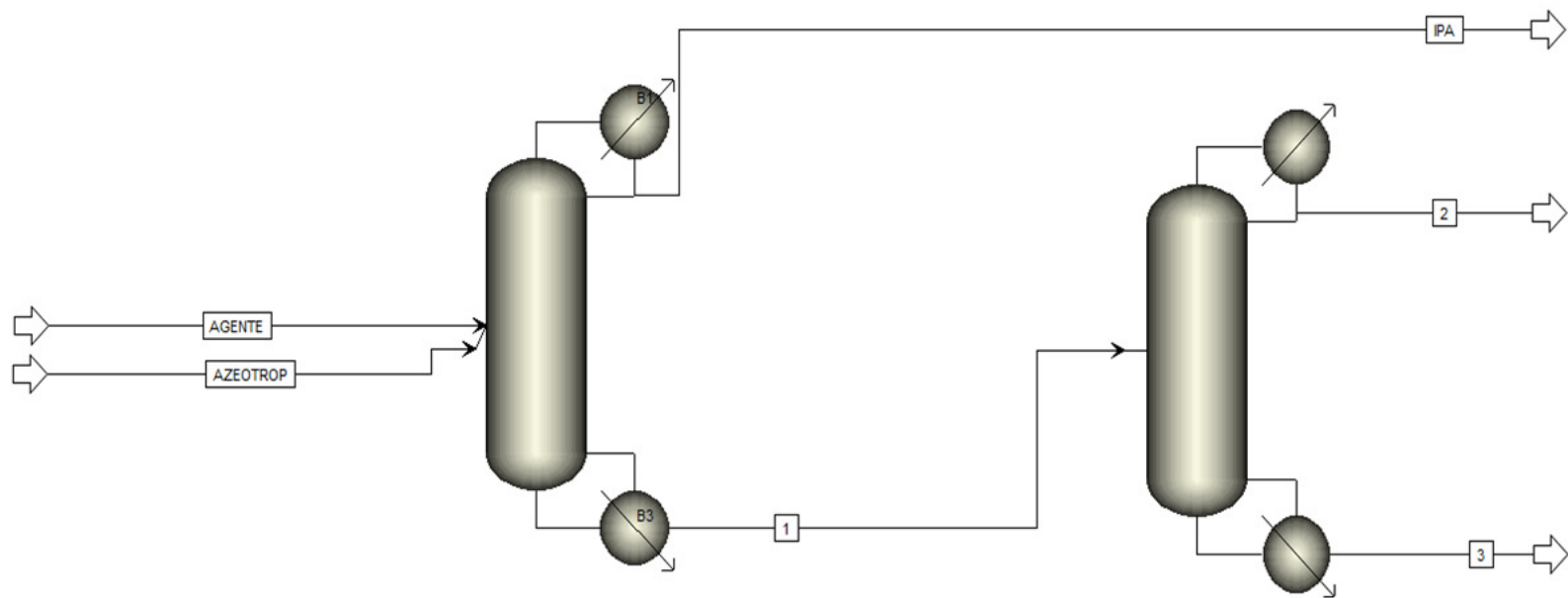


Figura 5.6. Esquema de la simulación para el sistema ternario isopropanol–agua–glicerol

Tabla 5.7. Tabla de corrientes para el sistema ternario isopropanol–agua–glicerol

Stream	ID		AGENTE	AZEOTROP	IPA	1	2	3
From					B1	B1	B3	B3
To			B1	B1		B3		
Phase			LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID
Substream:	MIXED							
Mole	Flow	kmol/hr						
WATER			3,1179E-6	.0195349	4.40319E-6	.0195336	8.9527E-3	.0105809
IPA			0.0	.0404250	4.64844E-4	.0399601	.0214379	.0185222
C3H8O-01			.0311758	0.0	4.8110E-11	.0311758	2,3826E-49	.0311758
Mole	Frac							
WATER			1,0E-4	.3258000	9.38351E-3	.2154377	.2945870	.1755333
IPA			0.0	.6742000	.9906164	.4407224	.7054130	.3072742
C3H8O-01			.9999000	0.0	1.02525E-7	.3438399	7,84E-48	.5171925
Total	Flow	kmol/hr	.0311790	.0599600	4.69247E-4	.0906697	.0303906	.0602790
Total	Flow	kg/hr	2,871190	2,781307	.0280145	5.624483	1.449621	4.174862
Total	Flow	l/min	.0389524	.0566124	6.40967E-4	.0968375	.0321018	.0663435
Temperature		K	353,1500	298,1500	350.7811	360.5452	349.0711	370.1463
Pressure		atm	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000
Vapor		Frac	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Liquid		Frac	1,000000	1,000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
Solid		Frac	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Enthalpy		cal/mol	-1,5681E+5	-73528.54	-73523.80	-1.0043E+5	-71749.06	-1.1468E+5
Enthalpy		cal/gm	-1702,870	-1585,144	-1231.533	-1618.925	-1504.189	-1655.884
Enthalpy		cal/sec	-1358,129	-1224,659	-9.583563	-2529.338	-605.6953	-1920.302
Entropy		cal/mol-K	-138,0890	-85,59959	-100.7876	-96.92016	-81.58293	-104.7271
Entropy		cal/gm-K	-1,499544	-1,845374	-1.688205	-1.562406	-1.710352	-1.512110
Density		mol/cc	.0133406	.0176521	.0122015	.0156051	.0157782	.0151431
Density		gm/cc	1,228501	.8188152	.7284447	.9680270	.7526157	1048799
Average		MW	92,08731	46,38605	59.70106	62.03263	47.69951	69.25891
Liq	Vol 60F	l/min	.0380369	.0572978	5.92611E-4	.0947421	.0299626	.0647795

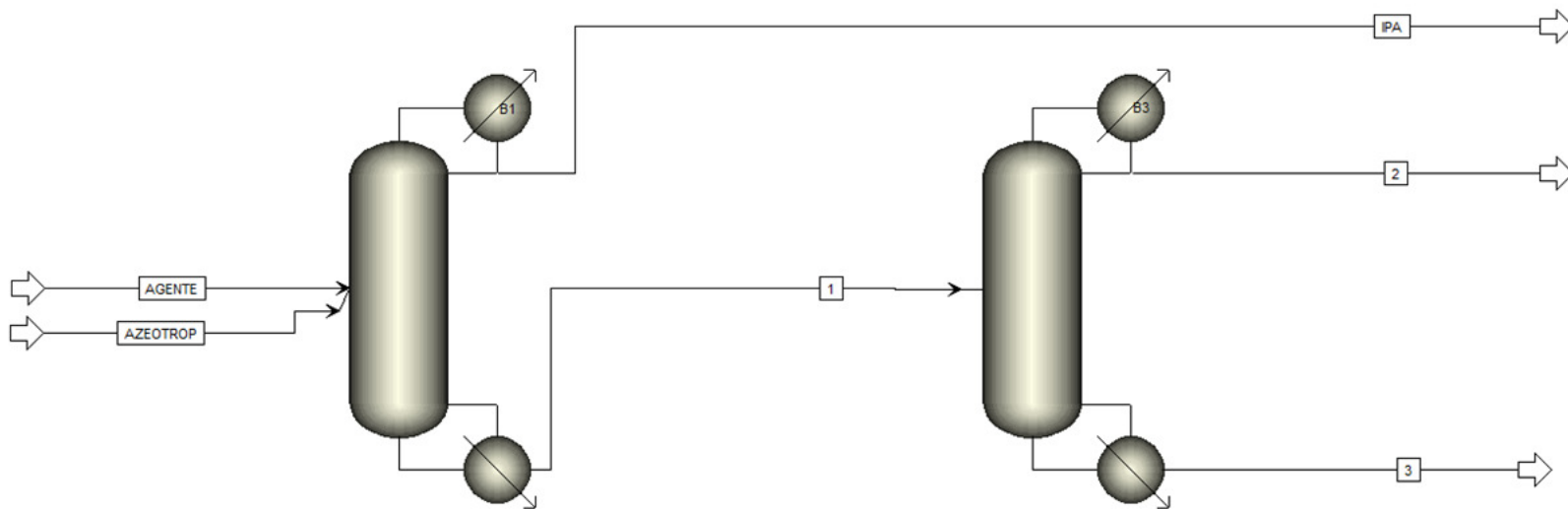


Figura 5.7. Esquema de la simulación para el sistema ternario isopropanol–agua–dietilenglicol

Tabla 5.8. Tabla de corrientes para el sistema ternario isopropanol–agua–dietilenglicol

Stream ID		AGENTE	AZEOTROP	IPA	1	2	3
From				B1	B1	B3	B3
To		B1	B1		B3		
Phase		LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID
Stream: MIXED							
Mole Flow	kmol/hr						
WATER		0.31179	.0195349	0.468057	.0195334	871.453	.0108188
IPA		0.0	.0404250	45.9209	.0399658	.0221297	.0178360
C4H10-01		.0311758	0.0	0.00034369	.0311758	8.4601E-33	.0311758
Mole Frac							
WATER		10	.3258000	.0100897	.2154219	.2825331	.1808244
IPA		0.0	.6742000	.9899028	.4407585	.7174669	.2981084
C4H10-01		.9999000	0.0	0.740883	.3438196	2.7428E-31	.5210672
Total Flow	kmol/hr	.0311790	.0599600	46.3893	.0906751	.0308442	.0598308
Total Flow	kg/hr	3308491	2781307	.0276812	6062117	1486902	4575214
Total Flow	l/min	.0518430	.0566124	63.3289	.1128602	.0329761	.0807605
Temperature	K	3531500	2981500	3507727	3605355	3490836	3704555
Pressure	atm	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000	.8400000
Vapor Frac		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Liquid Frac		1000000	1000000	1000000	1000000	1000000	1000000
Solid Frac		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Enthalpy	cal/mol	-1468900000	-73528.54	-73519.95	-96983.35	-71823.49	-1096900000
Enthalpy	cal/gm	-1384254	-1585144	-1232074	-1450644	-1489905	-1434410
Enthalpy	cal/sec	-1272164	-1224659	-9473720	-2442771	-6153733	-1822981
Entropy	cal/mol-K	-1613098	-8559959	-1007368	-1048306	-8237246	-1163242
Entropy	cal/gm-K	-1520173	-1845374	-1688184	-1568022	-1708733	-1521191
Density	mol/cc	.0100235	.0176521	.0122085	.0133904	.0155891	.0123473
Density	gm/cc	1063624	.8188152	.7285056	.8952251	.7515037	.9441929
Average	MW	1061128	4638605	5967168	6685536	4820675	7646918
Liq Vol 60F	l/min	.0520932	.0572978	58.5532	.1088055	.0307708	.0780346

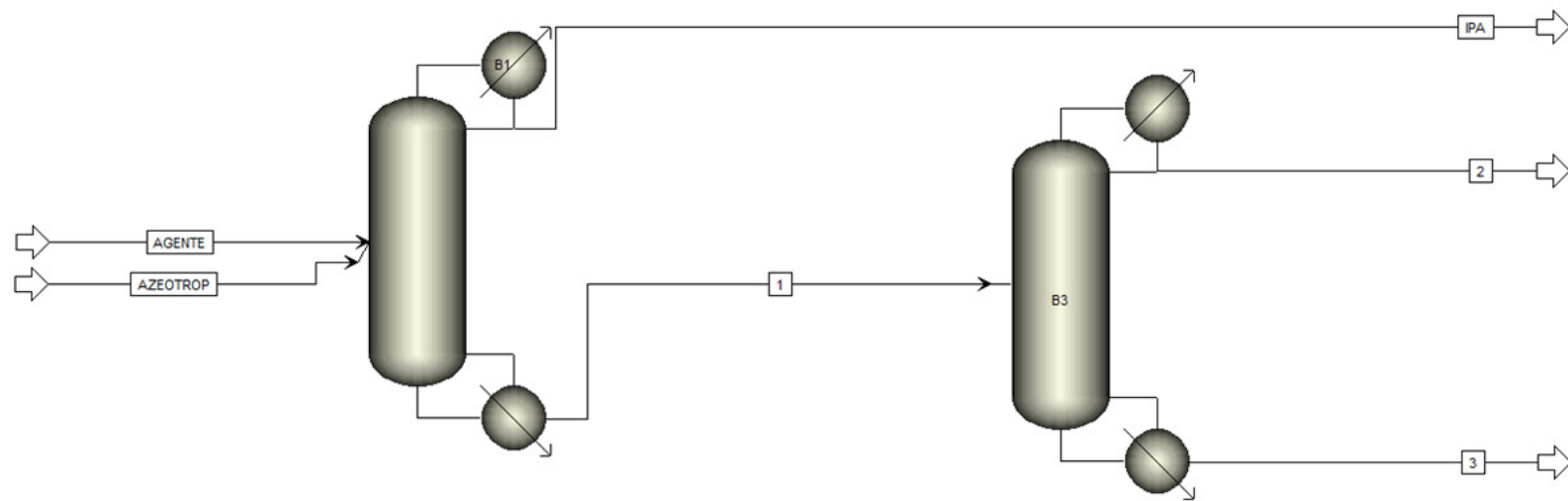


Figura 5.8. Esquema de la simulación para el sistema ternario isopropanol–agua–metoxipropanolacetato

Tabla 5.9. Tabla de corrientes para el sistema ternario isopropanol–agua–metoxipropanolacetato

Stream ID		AGENTE	AZEOTROP	IPA	1	2	3
From				B1	B1	B3	B3
To		B1	B1		B3		
Phase		LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID
Substream: MIXED							
Mole Flow	kmol/hr						
WATER		3.12E-01	.0195349	1.05E+02	.0184877	8.75E+02	9.74E+02
IPA		0.0	.0404250	.0101065	.0303184	.0216411	8.68E+02
C6H12-01		.0311758	0.0	4.50E+01	.0307257	6.44E-08	.0307257
Mole Frac							
WATER		1.00E+01	.3258000	.0904958	.2324562	.2879006	.1981675
IPA		0.0	.6742000	.8707255	.3812113	.7120994	.1765784
C6H12-01		.9999000	0.0	.0387786	.3863325	2.12E-06	.6252541
Total Flow	kmol/hr	.0311790	.0599600	.0116070	.0795319	.0303906	.0491412
Total Flow	kg/hr	4,120,244	2,781,307	.6857715	6,215,780	1,458,172	4,757,608
Total Flow	l/min	.0759105	.0566124	.0154085	.1234878	.0325627	.0923332
Temperature	K	3,531,500	2,981,500	3,551,537	3,658,215	3,533,516	3,800,258
Pressure	atm	1,000,000	1,000,000	1,000,000	1,000,000	1,000,000	1,000,000
Vapor Frac		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Liquid Frac		1,000,000	1,000,000	1,000,000	1,000,000	1,000,000	1,000,000
Solid Frac		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Enthalpy	cal/mol	-1.55E+09	-73528.54	-75940.49	-1.03E+09	-71610.20	-1.22E+09
Enthalpy	cal/gm	-1,174,057	-1,585,144	-1,285,334	-1,316,986	-1,492,474	-1,258,570
Enthalpy	cal/sec	-1,343,723	-1,224,659	-2,448,459	-2,273,915	-6,045,231	-1,663,273
Entropy	cal/mol-K	-1,705,262	-8,559,959	-9,683,535	-1,090,744	-8,151,529	-1,258,987
Entropy	cal/gm-K	-1,290,417	-1,845,374	-1,638,990	-1,395,625	-1,698,912	-1,300,406
Density	mol/cc	6.85E+02	.0176521	.0125548	.0107341	.0155549	8.87E+02
Density	gm/cc	.9046275	.8188152	.7417672	.8389198	.7463392	.8587746
Average MW		1,321,481	4,638,605	5,908,232	7,815,451	4,798,088	9,681,495
Liq Vol 60F	l/min	.0712004	.0572978	.0141995	.1142986	.0301599	.0841387

CONCLUSIONES

De acuerdo a las simulaciones realizadas los solventes que presentaron una pureza superior al 90% en moles fueron el metanol, la ciclohexanona, el Isobutanol y el monoetilenglicol, cada uno de estos pertenece a un grupo de separación diferente, sin embargo para el caso del Isobutanol y la ciclohexanona ambos pertenecen al grupo 2 correspondiente a azeótropos binarios con separación líquido – líquido, pero con la ciclohexanona se obtiene un mayor flujo de IPA puro y una pureza mayor, respecto al Isobutanol.

La ciclohexanona fue el mejor solvente, presentó la más alta pureza de IPA 0.9988 en moles, con un mayor flujo del mismo 0.0396818 Kmol/h; el segundo solvente que presentó una alta pureza de IPA fue el metanol con 0.9986 en moles, aunque el flujo de IPA para este no fue muy significativo 0.00691309 Kmol/h; finalmente, el solvente con el que se obtuvo un segundo mayor flujo de IPA fue con él O xileno 0.0391289 Kmol/h, sin embargo la pureza de IPA lograda no fue muy representativa 0.8602 en moles.

BIBLIOGRAFÍA

Wankat, P. C. (2008). Ingeniería de procesos de separación (2 ed.). Prentice Hall. México.

6. PRUEBAS DE LABORATORIO Y RESULTADOS

RESUMEN

En este capítulo se muestran las pruebas experimentales de los agentes de arrastre que presentaron mejores resultados en la simulación, siendo estos, ciclohexanona, metanol y monoetilenglicol; se partió de una mezcla IPA-Agua a una composición de 0.8233 en peso de IPA. Durante cada uno de los ensayos se tomaron muestras para analizar la pureza de IPA obtenida por densidad y por medio de la prueba de Karl Fischer.

6.1. PRUEBAS DE LABORATORIO

Teniendo en cuenta la simulación de cada uno de los agentes, se seleccionaron inicialmente los que lograron una pureza de IPA superior al 90% en moles y de los cuales el flujo obtenido fuera superior entre ellos. Con este criterio, se eligieron, la Ciclohexanona, el metanol, el isobutanol y el monoetilenglicol, sin embargo, el isobutanol no se tomó en cuenta para las pruebas experimentales, pues presenta el mismo comportamiento que la Ciclohexanona, perteneciendo así al mismo grupo, por esta razón, se decidió trabajar con uno de los dos, escogiéndose así la ciclohexanona por ser más económica en el análisis preliminar realizado previamente, por presentar ciclos en la simulación y por obtener mayor flujo de IPA. En estos procesos se utilizó el montaje de una torre de destilación en vidriería de la universidad EAFIT, la cual se adecuó con un aislamiento térmico con el fin de evitar pérdidas de calor, como se puede apreciar en la Figura 6.1.

Para los tres procesos, se trabajó con una mezcla de IPA-agua, proporcionada por la empresa Invesa S.A con una densidad de 0.825 g/ml.

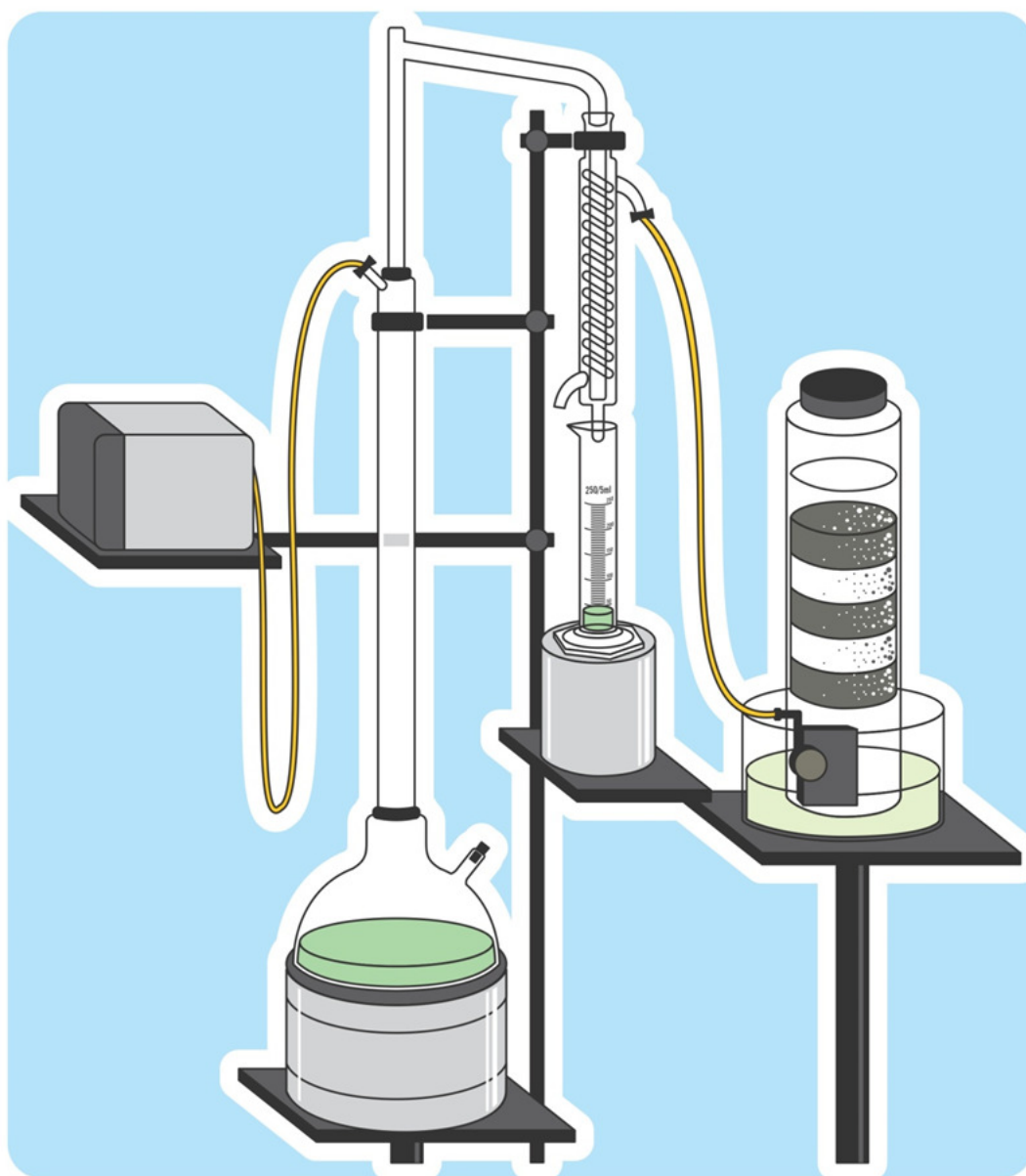


Figura 6.1. Montaje de la torre de destilación en vidriería

6.1.1. Ciclohexanona.

Se mezclaron en un beaker 2784 ml de IPA-agua con 1217 ml de Ciclohexanona, midiéndose su densidad que alcanzó un valor de 0.86 g/ml. Esta mezcla se vertió a la torre de destilación de vidrio, donde se inició el proceso de destilación que terminó cuando se logró un volumen de 2551 ml. Sin embargo, este valor no fue alcanzado, teniendo pérdidas de 186 ml, esto se debe a la volatilidad que tiene la

ciclohexanona, siendo esta sustancia más volátil comparado con las otras dos trabajadas; también a la prueba realizada a nivel de laboratorio, donde los equipos presentan más fugas pero se espera que si el ensayo se realiza a nivel de producción los equipos se encuentren más sellados y sea posible evitar este tipo de pérdidas. Se tomaron muestras periódicas tanto del balón como del destilado para análisis de pureza obtenida. Este proceso anterior se realizó por 5 veces para lograr un buen volumen para decantación. Luego, la cantidad sobrante del balón de cada destilación, se trasladó a un decantador de vidrio donde se dejó reposar por 24 horas para lograr una separación de fases, ya que esta sustancia presenta equilibrio líquido-líquido. Sin embargo, este equilibrio no se logró en este punto, sometiendo 4000 ml del decantador a destilación, alcanzado únicamente 26 ml de destilado. Estos 26 ml se obtuvieron logrando el equilibrio, puesto que en la probeta se observa la presencia de dos fases, tal como se evidencia en la Figura 6.2, esto se debe a que la Ciclohexanona se concentró en la parte superior del vapor y cuando se condensaba causaba la formación de una segunda fase líquida que puede ser decantada y recirculada a la torre como un reflujo; esto debido a que los límites de destilación se pueden cruzar, ya que la Ciclohexanona divide o separa la fase en regiones y por lo tanto las dos fases líquidas pueden caer en diferentes áreas de destilación. (Lei *et al.*, 2005). En todo el proceso, se recogieron muestras para realizar el análisis de pureza correspondiente.

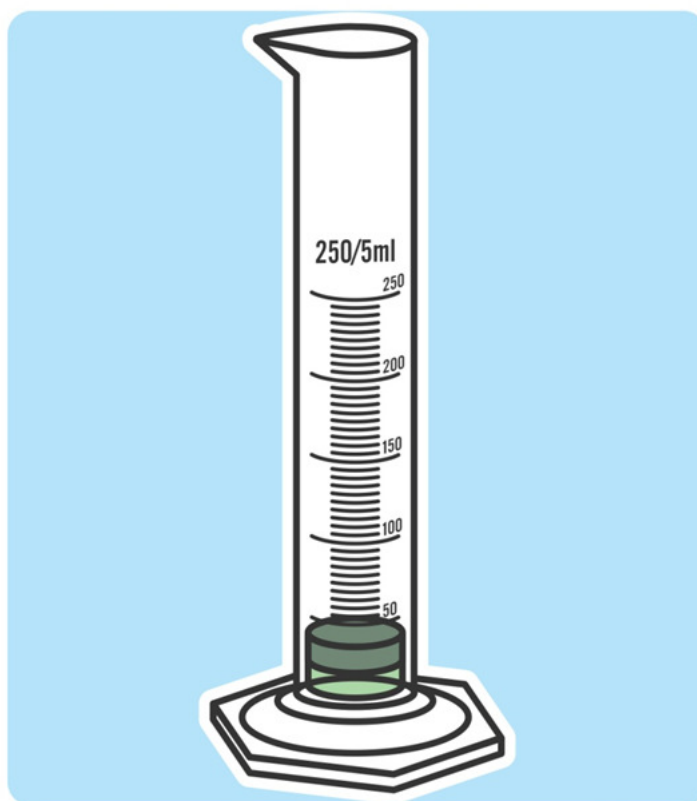


Figura 6.2. Separación de fases a partir de la segunda destilación

6.1.2. Metanol

Se inició mezclando 2628,2108 ml de IPA-agua con 1371,789 ml de metanol, se midió su densidad para verificar por medio de los datos de la simulación si coincidía con la densidad de la mezcla, logrando así un valor de 0,815 g/ml. Esta mezcla, se trasladó a la torre, dando inicio a la destilación, la cual culminó cuando se obtuvo un volumen esperado de destilado, correspondiente a 2408,72 ml de IPA. Mientras transcurría el proceso, se tomaban muestras para hacer lectura de densidad y para ser enviadas a análisis y observar la presencia y pureza de IPA. Lo restante del balón (1591.28 ml) se destiló hasta lograr un volumen de 1316.99 ml de destilado. Sin embargo, este valor no fue alcanzado, teniendo pérdidas de 179.99 ml, esto se ocasiono por las mismas razones de la Ciclohexanona, anteriormente redactadas. En esta última destilación se tomó muestra del balón y muestras periódicas para analizar lo obtenido.

6.1.3. Monoetilenglicol

Inicialmente se vertieron 3000 ml de la mezcla IPA-agua al balón de la torre de destilación y se comenzó el proceso. Al mismo tiempo, se calentaba en una

plancha monoetilenglicol hasta lograr 80 °C. Cuando se alcanzó la primera gota destilada, 163,865 ml/min de monoetilenglicol se bombearon a la torre por medio de una bomba peristáltica a 100 RPM, estos RPM se determinaron realizando pruebas de bombeo midiendo cantidades y tiempos para calcular un flujo, correspondiente a 124,7401 ml/min. Se hizo uso de esta cantidad de agente, ya que, según el libro de ingeniería de procesos de separación (Wankat, 2008), se acostumbra a usar 15,10, 20 o hasta 30 veces más solventes que la alimentación. El proceso culminó cuando se alcanzaron 2749.48 ml de destilado de IPA. Al igual que los procesos anteriores se tomaron muestras periódicas con el mismo objetivo. Con lo restante del balón se siguió el mismo procedimiento que el metanol hasta alcanzar un volumen 158,345 ml.

6.2. RESULTADOS

6.2.1. Densidad

Del libro manual del ingeniero químico de Perry y otros fue obtenida la pureza en moles de IPA, mediante una lectura o interpolación que dependía según la temperatura y la densidad de la muestra (Perry *et al.*, 1992).

A continuación en la Tabla 6.1 hasta la Tabla 6.3 se reportan los resultados obtenidos para el metanol, monoetilenglicol y ciclohexanona respectivamente, divididos por muestras en probetas organizadas a medida que transcurre el proceso para estos tres agentes de arrastre con respecto a la lectura de la densidad.

Tabla 6.1. Moles de IPA obtenidas con metanol a partir de la densidad

Metanol												
1ra Destilación							2da Destilación					
Muestra	Volumen (ml)	Tiempo (Minutos)	Densidad (g/ml)	Temperatura (°C)	% Peso de IPA	% moles de IPA	Muestra	Volumen (ml)	Tiempo (Minutos)	Densidad (g/ml)	Temperatura (°C)	% Peso de IPA
Muestra 1	254	43.0833	0.8	27	91.97	77.4280	Muestra 1	254	15.2333	0.807	29	88.58
Muestra 2	262	51.7500	0.8	29	91.43	76.1636	Muestra 2	252	24.9000	0.81	29	87.36
Muestra 3	252	60.0000	0.8	30	91.16	75.5413	Muestra 3	252	50.1667	0.815	29	85.32
Muestra 4	254	85.0500	0.802	30	90.36	73.7350	Muestra 4	100	68.0000	0.83	26	80.02
Muestra 5	250	93.4167	0.802	28	89.83	72.5685						
Muestra 6	252	101.7833	0.805	29	89.4	71.6391						

En la Tabla 6.1 se evidencia que en la primera destilación la pureza de IPA disminuye a medida que transcurre la destilación, lo que coincide con el protocolo de un proceso de destilación ya que, la volatilidad del agente de arrastre permite que este se concentre en unos puntos más que en otros mientras transcurre el proceso. Para el caso de la segunda destilación, se observa que se empieza con un valor alto de pureza de IPA, lo que no coincide con lo que se había planteado,

donde la segunda destilación consistía en la separación del metanol; sin embargo se observa que la separación de IPA termina en esta destilación en la probeta 2, ya que la composición en moles de IPA alcanza el punto azeotrópico; por lo tanto, la separación del agua con el metanol comienza a partir de este punto.

Tabla 6.2. Moles de IPA obtenidas con monoetilenglicol a partir de la densidad

Monoetilenglicol													
1ra Destilación							2da Destilación						
Muestra	Volumen (ml)	Tiempo (Minutos)	Densidad (g/ml)	Temperatura (°C)	% Peso de IPA	% moles de IPA	Muestra	Volumen (ml)	Tiempo (Minutos)	Densidad (g/ml)	Temperatura (°C)	% Peso de IPA	% moles de IPA
Muestra 1	261	30.0833	0.805	28	89.68	72.2426	Muestra 1	166	25.7333	0.865	26	65.39	36.1373
Muestra 2	255	37.6333	0.81	30	87.08	66.8722							
Muestra 3	255	45.3833	0.81	30	87.08	66.8722							
Muestra 4	260	53.0333	0.81	30	87.08	66.8722							
Muestra 5	256	60.0000	0.81	30	87.08	66.8722							
Muestra 6	295	69.4500	0.81	30	87.08	66.8722							
Muestra 7	295	78.2667	0.81	30	87.08	66.8722							
Muestra 8	295	87.3500	0.81	29	87.36	67.4264							
Muestra 9	260	96.6167	0.81	30	87.08	66.8722							
Muestra 10	256	101.5500	0.815	30	85.04	62.9974							

En la Tabla 6.2, se observa que en la primera destilación en la probeta 1, se obtiene IPA a una composición mayor que la azeotrópica, esto se debe a que al comienzo el agente de arrastre está más concentrado y a que este tiene un punto de ebullición mayor (191.34°C) que el del IPA y el agua que se están separando; por lo tanto, el agua tiene volatilidad reducida y se siente atraída por el monoetilenglicol, entonces el IPA se vuela relativamente más volátil y es sencillo sacarlo en el destilado (Wankat, 2008).

Por otra parte, en la sección superior de la columna, el solvente relativamente no volátil se elimina y se produce IPA con un alto grado de pureza como destilado; en la sección intermedia están presentes grandes cantidades del solvente y la mezcla de IPA más agua se separa uno de otro, por lo tanto la concentración de solvente en esta sección es muy alta (Wankat, 2008).

Como se puede apreciar en esta misma tabla para la primera destilación la pureza de IPA disminuye a medida que transcurre la destilación, alcanzando una composición cercana a la azeotrópica, porque cierta cantidad de agua alcanza a llegar a la sección superior, donde se encuentra el IPA y por la poca cantidad de solvente en esta sección el agua no se alcanza a separar y sale en el destilado.

En el producto de fondo que teóricamente contiene únicamente monoetilenglicol y agua, proveniente de la primera destilación es enfriado y destilado nuevamente, haciendo referencia a la segunda destilación; respecto a esta, se observa que la pureza de IPA disminuyó significativamente y solo hay una muestra reportada, ya que esta destilación es muy corta porque el agua es apreciablemente más volátil que el monoetilenglicol (Wankat, 2008).

Tabla 6.3. Moles de IPA obtenidas con ciclohexanona a partir de la densidad

Ciclohexanona						
1ra Destilación						
Muestra	Volumen (ml)	Tiempo (Minutos)	Densidad (g/ml)	Temperatura (°C)	% Peso de IPA	% moles de IPA
Muestra 1	252	42.6000	0.82	30	83.000	59.3870
Muestra 2	256	56.3000	0.82	28	83.544	60.3255
Muestra 3	256	70.3333	0.82	28	83.544	60.3255
Muestra 4	258	84.0333	0.82	28	83.544	60.3255
Muestra 5	252	98.4667	0.82	30	83.000	59.3870
Muestra 6	256	113.0000	0.82	29	83.272	59.8541
Muestra 7	280	128.5000	0.82	29	83.272	59.8541
Muestra 8	284	144.0333	0.82	29	83.272	59.8541
Muestra 9	229	162.2333	0.8	29	91.388	76.0663
Producto de fondo	1223	195.4333	0.935	24	36.6875	14.7885

En la Tabla 6.3 se observa que el porcentaje de pureza de IPA no es muy variable durante la destilación y no supera el punto azeotrópico, únicamente en la probeta 9 que corresponde a la última muestra de esta destilación donde se alcanza un valor 9 puntos superior al azeotrópico, esto se debe a que el agente de arrastre no lograba tener efecto entre la mezcla en un periodo de tiempo corto, su comportamiento y formación de un azeótropo con la mezcla se logra a una determinada temperatura. Es de aclarar que hasta la probeta 9 de la primera destilación se logro el volumen total de destilado calculado previamente por medio de un balance de masa. Finalmente, el dato obtenido en el balón muestra una pureza de IPA pequeña, lo que expresa que se logró en el destilado separar cierta cantidad de IPA dejando así, la Ciclohexanona y el agua al final, porque si es comparada con la densidad de la Ciclohexanona que es de 0.94 g/ml este valor es muy cercano a 0.935 g/ml.

6.2.2. Karl Fischer

Se realizó la prueba de Karl Fischer a las muestras más representativas en la empresa Invesa S.A, obteniéndose así los resultados que se presentan a continuación.

Tabla 6.4. Porcentaje de agua obtenido con metanol a partir de Karl Fischer

Metanol							
1ra Destilación				2da Destilación			
Muestra	Volumen (ml)	Tiempo (Minutos)	% moles de H ₂ O	Muestra	Volumen (ml)	Tiempo (Minutos)	% moles de H ₂ O
Muestra 1	254	43.0833	3.1427	Muestra 1	254	15.2333	25.8346
Muestra 2	262	51.7500	2.1536	Muestra 2	252	24.9000	28.8791
Producto de fondo	-----	105.5333	21.5350	Muestra 4	100	68.0000	17.5070
				Producto de fondo	-----	75.4000	50.3560

En la Tabla 6.4, se observa que para el caso de la primera destilación con metanol los porcentajes de agua son bajos; lo que indica que hay presencia en una concentración alta de alguna o de las dos sustancias de la mezcla. En la segunda destilación se tomaron las muestras con menor porcentaje de IPA en moles, debido a que se había planteado que esta destilación se separaba el agua y el metanol.

Respecto al monoetilenglicol esta prueba se realizó a algunas muestras, debido a que a partir de la probeta 2 hasta la 7 las densidades fueron las mismas, como se observa en la Tabla 6.2. Aunque los resultados obtenidos no fueron los mejores con respecto al objetivo planteado, debido a que solo en la primera probeta se alcanzó una pureza de IPA superior a la azeotrópica; se realizó esta prueba con el fin de corroborar los datos obtenidos por densidades

Tabla 6.5. Porcentaje de agua obtenido con monoetilenglicol a partir de Karl Fischer

Monoetilenglicol							
1ra Destilación				2da Destilación			
Muestra	Volumen (ml)	Tiempo (Minutos)	% moles de H ₂ O	Muestra	Volumen (ml)	Tiempo (Minutos)	% moles de H ₂ O
Muestra 1	261	30.0833	23.9281	Muestra 1	166	25.7333	69.4544
Muestra 2	255	37.6333	25.5692	Producto de fondo	----	35.2500	33.7776
Muestra 4	260	53.0333	27.8740				
Muestra 8	295	87.3500	30.2978				
Muestra 9	260	96.6167	30.1372				
Muestra 10	256	101.5500	31.4992				
Producto de Fondo	-----	110.9500	49.6327				

En la Tabla 6.5 se observa que en la primera destilación con monoetilenglicol la primera probeta es la que presenta menor porcentaje de humedad, lo que corrobora una concentración alta de alguna o de las dos sustancias de la mezcla; sin embargo este porcentaje no tiene gran variación numérica entre muestras. En la segunda destilación la muestra con mayor porcentaje de humedad es consistente, en esta destilación se separaba el agua y el monoetilenglicol.

Tabla 6.6. Porcentaje de agua obtenido con ciclohexanona a partir de Karl Fischer

Ciclohexanona							
1ra Destilación				2da Destilación			
Muestra	Volumen (ml)	Tiempo (Minutos)	% moles de H ₂ O	Muestra	Volumen (ml)	Tiempo (Minutos)	% moles de H ₂ O
Muestra 1	252	42.6000	45.6093	Muestra 1 parte inferior	26	117.0000	-----
Muestra 9	229	162.2333	16.9827	Muestra 1 parte superior	26	117.0000	80.9843
Producto de fondo	1223	195.4333	20.0433	Producto de fondo	3974	183.0000	3.0920

En la Tabla 6.6 se observa que en la primera destilación, la probeta 9 es la que presenta menor cantidad de agua, lo que expresa que en esta probeta hay más cantidad de IPA o del agente de arrastre empleado y la probeta 1 contiene el valor más alto en porcentaje de agua, lo que determina que inicialmente cierta cantidad de agua empezó a evaporarse y a salir por el destilado, disminuyéndose su valor a través del tiempo. En el caso de la segunda destilación, el dato del destilado inferior que corresponde a la fase inferior obtenida en el destilado no se reporta, debido a la incoherencia de datos de lectura, es decir, se repitió varias veces el procedimiento lográndose cada vez un dato que difiere mucho del anterior y para el destilado superior se obtuvo agua a una pureza significativa, lo que expresa que la formación de la segunda fase con el agente de arrastre era agua, siendo esto lógico puesto que la separación del agente y del agua se debe lograr en la segunda destilación. Finalmente, analizando el dato de la tabla del balón, este contiene una pequeña cantidad de agua, lo que determina que en este punto ya mucha cantidad del agua de la mezcla se había destilado, sea en la primera, segunda destilación o ambas.

CONCLUSIONES

Según las pruebas experimentales, el agente que no presento pérdidas teniendo como base los cálculos de volumen fue el monoetilenglicol, una de las razones es que esta sustancia es relativamente no volátil si se compara con el metanol y la Ciclohexanona. También, cabe agregar que esta última no cumplió con el procedimiento que se tenía estudiado teóricamente, puesto que no presento equilibrio líquido-líquido en la decantación.

Una de las ideas de estas pruebas fue trabajar diferentes comportamientos de la mezcla con la adición de un agente, este fue uno de los motivos por los cuales no se trabajó con Isobutanol puesto que presentaba el mismo comportamiento de la Ciclohexanona.

Para los tres solventes trabajados la pureza obtenida de IPA por medio de la densidad supera la composición azeotrópica con valores en moles de 72.2426%,

76.0663% y 77.4280% para el monoetilenglicol, ciclohexanona y metanol respectivamente; mientras que el solvente que presento un menor porcentaje de agua en una de las muestras tomadas fue el metanol con un valor de 2.1536%, lo cual indica que hay presencia en una concentración alta de alguna o de las dos sustancias de la mezcla, seguido por la ciclohexanona 20.0433% y por último el monoetilenglicol con 23.9381%.

BIBLIOGRAFÍA

Perry, H. R., Don W. Green., & Maloney, James. O. (1992). *Chemical Engineer's Handbook*. (6th ed.). Vol. 3. 6 vols. Kansas: McGraw-Hill.

Lei, Z., Chen, B., & Ding, Z. (2005). *Special Distillation Processes* (1st ed.). Netherlands: Elsevier.

Wankat, P. C. (2008). *Ingeniería de procesos de separación* (2 ed.). Prentice Hall. México

7. ANÁLISIS DE RESULTADOS

RESUMEN

En este capítulo, se comparan los resultados obtenidos por los costos obtenidos por los cálculos de la regla de la palanca en el camino de destilación con los costos obtenidos por medio de la simulación; por otra parte se realiza una comparación de la pureza obtenida por medio de la densidad y la prueba de Karl Fischer para el metanol el monoetilenglicol y la ciclohexanona.

7.1. ANÁLISIS DE RESULTADOS

7.1.1. Análisis por costos

A continuación en la Tabla 7.1 se muestran los costos preliminares obtenidos por los cálculos de la regla de la palanca en el camino de destilación y en la Tabla 7.2 se observan los costos determinados por la simulación.

Tabla 7.1. Costos preliminares obtenidos por los cálculos de la regla de la palanca en el camino de destilación

Alternativa	Flujo solvente	Costo solvente	Flujo desechos	Costo desechos	Flujo IPA (Kg/h)	Costo IPA (\$/Kg)	Costo incineración (\$/Kg)	Costo total
Nula	--	--	--	--	2,5	--	1200	3000
O-xileno	0,636152664	3350	19,97136532	0,5	0,369939278	1070	--	1.745,26
Ciclohexanona	0,145133782	5620	0,545806994	0,5	2,416385349	1070	--	1.769,61
Isobutanol	0,079466567	3020	0,431601573	0,5	2,403869203	1070	--	2.331,94
Metanol	0,016602858	1280	0	0,5	2,559198849	1070	--	2.717,09

Tabla 7.2. Costos obtenidos por la simulación (ASEI, 2013)★

Alternativa	Flujo solvente	Costo solvente	Flujo desechos	Flujo IPA (Kg/h)	Costo IPA (\$/Kg)	Costo incineración (\$/Kg) ★	Costo total
Nula	--	--	--	2,5	--	1200	3000
Isobutanol	1,0535923	3020	1,0097199	2,3423803	1070	1500	2.190,08
Ciclohexanona	1,3950596	5620	0	2,3844794	1070	1500	5.288,84
Glicerol	2,8713932	1350	4,7641679	0,0279322	1070	1500	10.992,75
Monoetilenglicol	1,9350245	2830	4,1885056	0,5259293	1070	1500	11.196,13
Metanol	6,7407657	1280	2,0499694	0,4154076	1070	1500	11.258,65
Dietilenglicol	3,3083759	3660	6,0615261	0,0275939	1070	1500	21.171,42
O-xileno	43,907776	3350	0,6739564	2,4674676	1070	1500	145.461,79
Metoxipropanol acetato	54,661376	4975	6,2598668	0,6859155	1070	1500	280.596,22

En la Tabla 7.1 y la Tabla 7.2 se evidencia que los costos de la simulación son más altos que los costos preliminares obtenidos por los cálculos de la regla de la palanca en el camino de destilación, debido a que los flujos de solvente requerido son más altos, al igual que el flujo de desechos, ya que, en la simulación no fue posible alcanzar todas las recirculaciones planteadas en los diagramas de bloques. Además, los desechos generados en la misma se tratan por incineración, que es un método más costoso respecto al de tratamiento de aguas empleado para tratar los desechos obtenidos en los diagramas de bloques. Por otra parte, se recupera mayor cantidad de IPA en estos diagramas de bloques, exceptuando el o-xileno, sin embargo, este no tuvo una pureza muy alta en la simulación y el costo de la simulación es el segundo más alto con respecto a los otros agentes. A pesar de todos los factores anteriormente mencionados, se observa que el costo del Isobutanol es mayor por regla de la palanca que por la simulación.

Aunque el precio de un agente sea más económico que otros, no es un factor significativo en el costo total para cualquiera de los dos procesos.

Con respecto a los agentes modelados por destilación extractiva, analizando los costos determinados por la simulación, el glicerol y el monoetilenglicol son los más económicos, siendo este último el que se requiere en menor cantidad para la separación; también tiene el menor flujo de desechos comparados con los demás solventes de destilación extractiva.

7.1.2. Análisis de pureza

A Continuación en la Tabla 7.3 hasta la Tabla 7.5 se muestran para cada método de análisis de pureza los resultados obtenidos para el metanol, el monoetilenglicol y la ciclohexanona.

Tabla 7.3. Resultados de los análisis de pureza para el metanol

Metanol									
1ra Destilación					2da Destilación				
Muestra	Volumen (ml)	Tiempo (Minutos)	% moles de IPA por densidad	% moles de H ₂ O por Karl Fischer	Muestra	Volumen (ml)	Tiempo (Minutos)	% moles de IPA por densidad	% moles de H ₂ O por Karl Fischer
Muestra 1	254	43.0833	77.4280	3.1427	Muestra 1	254	15.2333	69.9076	25.8346
Muestra 2	262	51.7500	76.1636	2.1536	Muestra 2	252	24.9000	67.4264	28.8791
Producto de fondo	-----	105.5333	-----	21.5350	Muestra 4	100	68.0000	54.5352	17.5070
					Producto de fondo	-----	75.4000	-----	50.3560

Como se observa en la Tabla 7.3 para la primera destilación comparando la densidad con los resultados obtenidos por Karl Fischer se afirma que en este caso se obtuvo IPA a una concentración alta, ya que el porcentaje de humedad es un valor pequeño. En cuanto al balón de la primera destilación, se observa que hay un porcentaje de agua más alto que en las muestras del destilado, lo cual es coherente con lo que se había planteado, donde después de la primera destilación se obtenía agua con el agente de arrastre como producto de fondo.

Con respecto a la segunda destilación los resultados por Karl Fischer coinciden con lo obtenido por densidad puesto que en este punto inicia la separación del agua con el metanol. En las muestras destiladas para este segundo ensayo se obtiene poca agua, lo que confirma que el producto del destilado es IPA con el metanol y por densidad se puede apreciar el porcentaje en moles de IPA.

Tabla 7.4. Resultados de los análisis de pureza para el monoetilenglicol

Monoetilenglicol									
1ra Destilación					2da Destilación				
Muestra	Volumen (ml)	Tiempo (Minutos)	% moles de IPA por densidad	% moles de H ₂ O por Karl Fischer	Muestra	Volumen (ml)	Tiempo (Minutos)	% moles de IPA por densidad	% moles de H ₂ O por Karl Fischer
Muestra 1	261	30.0833	72.2426	23.9281	Muestra 1	166	25.7333	36.1373	69.4544
Muestra 2	255	37.6333	66.8722	25.5692	Producto de fondo	----	35.2500	-----	33.7776
Muestra 4	260	53.0333	66.8722	27.8740					
Muestra 8	295	87.3500	67.4264	30.2978					
Muestra 9	260	96.6167	66.8722	30.1372					
Muestra 10	256	101.5500	62.9974	31.4992					
Producto de Fondo	-----	110.9500	-----	49.6327					

Como se puede apreciar en la Tabla 7.4, comparando los resultados de la primera destilación por la densidad y la prueba de Karl Fischer, en ambos casos no se presentan grandes variaciones entre una muestra y otra, sin embargo, el porcentaje más alto se encontró en la primera muestra; con lo que se verifica que la mayor cantidad de IPA en moles se obtiene en la primera probeta; en cuanto al balón de la primera destilación el valor generado a partir de la prueba de Karl Fischer confirma que allí se encuentra una mezcla del monoetilenglicol y agua, con pequeñas trazas de IPA; igualmente sucede con el balón de la segunda destilación, con lo que se concluye que el IPA se destilo completamente; finalmente la probeta de la segunda destilación es la muestra con menor porcentaje de IPA en moles respecto a las demás por medio de los análisis, Por lo tanto se valida, que la primera destilación separo el IPA del monoetilenglicol y el agua y en la segunda destilación separo el agua debido a los resultados de humedad reportados por Karl Fischer, sin embargo, el agua de esta destilación contiene trazas de IPA.

Tabla 7.5. Resultados de los análisis de pureza para la ciclohexanona

Ciclohexanona									
1ra Destilación					2da Destilación				
Muestra	Volumen (ml)	Tiempo (Minutos)	% moles de IPA por densidad	% moles de H ₂ O por Karl Fischer	Muestra	Volumen (ml)	Tiempo (Minutos)	% moles de IPA por densidad	% moles de H ₂ O por Karl Fischer
Muestra 1	252	42.6000	59.3870	45.6093	Muestra 1 parte inferior	26	117.0000	-----	-----
Muestra 9	229	162.2333	76.0663	16.9827	Muestra 1 parte superior	26	117.0000	-----	80.9843
Producto de fondo	1223	195.4333	-----	20.0433	Producto de fondo	3974	183.0000	14.7885	3.0920

Como se muestra en la Tabla 7.5 para la primera destilación los resultados arrojados por densidad y por la prueba de Karl Fischer son coherentes con las dos mediciones puesto que a mayor porcentaje de IPA menor porcentaje agua; en cuanto al balón el valor arrojado por la prueba de Karl Fischer afirma que allí se

encuentra una mezcla de agua y ciclohexanona, esta última en mayor concentración, con pequeñas trazas de IPA; igualmente sucede con el balón de la segunda destilación, ya que se obtiene la misma composición en moles de IPA, pero con un menor porcentaje de agua, por lo que se concluye que el agua salió como producto de destilado en la segunda destilación y el IPA que no se destiló en la primera queda como producto de fondo con el agente de arrastre; finalmente la segunda destilación parte superior es la muestra con mayor porcentaje de agua a las demás, por lo tanto se corrobora que esta tiene en su mayoría una mezcla de ciclohexanona más agua, está en mayor concentración, con pequeñas trazas de IPA.

Nota: es de aclarar que a algunas muestras de los tres solventes no fue posible obtener la concentración en moles de IPA por el método de densidad, debido a que el volumen obtenido en el laboratorio no era suficiente para medir la densidad

CONCLUSIONES

El costo de la simulación del o-xileno fue uno de los más altos y con los que se obtuvo una menor pureza del IPA, respecto a los demás solventes, mientras que el o-xileno evaluado por los costos de la regla de la palanca es la primera alternativa más viable; este efecto también se ve reflejado para el isobutanol, pero con los costos invertidos; Sin embargo ambos costos coinciden en que la ciclohexanona es la segunda alternativa más factible económicamente.

Las pruebas realizadas para la determinación de la pureza coinciden con los diferentes agentes de arrastre empleados, siendo la probeta uno del monoetilenglicol y el metanol y la nueve para la ciclohexanona las muestras de mayor porcentaje en moles de IPA.

Los mayores porcentajes de pureza de IPA se obtuvieron con el metanol en la probeta uno con 77.4280%, seguido de la ciclohexanona en la probeta nueve con 76.0663%; sin embargo la pureza obtenida con ciclohexanona no refleja una diferencia muy significativa, en cuanto a los datos obtenidos con el metanol.

Las tres destilaciones se llevaron a cabo en su totalidad, ya que de acuerdo a los datos obtenidos por cada método las cantidades de IPA en los balones de la segunda destilación son casi nulas para los tres casos.

BIBLIOGRAFÍA

ASEI Indexold. (2013, Sept 12). Asesorías, servicios ecológicos e industriales.
Consultado en <http://asei.com.co/indexold.html>

8. SELECCIÓN DEL AGENTE DE ARRASTRE

RESUMEN

Este capítulo tiene como finalidad la elección del agente de arrastre apropiado comparado con otros dos agentes previamente estudiados. El agente se escoge teniendo como base el objetivo planteado en este proyecto, eligiéndose así la Ciclohexanona como el agente con mejores resultados arrojados.

8.1. Selección del agente de arrastre

De acuerdo a los resultados reportados durante el desarrollo de este proyecto, se selecciona la Ciclohexanona como el agente de arrastre con los mejores resultados. A continuación se explica el porqué de esta elección:

Respecto a los costos al compararlo con los tres agentes elegidos para pruebas experimentales, la ciclohexanona fue la que presentó menor costo tanto en la simulación como en los cálculos por regla de la palanca, con valores de 5288,84 COP y 1769,61 COP respectivamente.

En cuanto a la simulación fue el agente que presentó un mayor porcentaje de pureza de IPA y un mayor flujo con valores de 99.8760% en moles y 0,03968 Kmol/h respectivamente. Adicionalmente, la ciclohexanona era el único agente al que fue posible simularlo recirculaciones, por lo tanto no generó flujo de desechos.

Finalmente en los resultados arrojados por las pruebas de laboratorio el porcentaje de pureza de IPA fue el segundo más alto (76.0663%), sin una diferencia significativa en cuanto al metanol (77.4280%).

CONCLUSIONES

Se analizaron los resultados obtenidos de la Ciclohexanona con metanol y monoetilenglicol, eligiéndose así, la Ciclohexanona como el mejor agente de arrastre por presentar menores costos, mayor pureza tanto en simulación como en experimentación.

9. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

9.1. Conclusiones

En este proyecto se separó la mezcla azeotrópica IPA-agua con el uso de agentes de arrastre proporcionados por la compañía Invesa S.A y que fueron seleccionados a partir de los resultados que se iban obteniendo en el desarrollo de este

Mediante la elaboración de esquemas de separación se observó el comportamiento del agente con la mezcla, determinándose así una división por grupos de acuerdo a la formación de azeótropos y a su tipo de equilibrio en: Azeótropos ternarios y binarios con separación líquido-líquido, Azeótropos binarios con separación líquido-líquido, Azeótropo binario sin separación líquido-líquido, Solventes sin límite de destilación y solventes no factibles. De allí, se eligió un camino de destilación que fue la base para un análisis preliminar de costos, obteniéndose así el Etilacetato como el agente de mayor costo (60926,55 COP) comparado con la alternativa actual de la empresa Invesa que corresponde a incineración de la mezcla (3000 COP). De acuerdo a estos costos se eligieron o-xileno, Ciclohexanona, Isobutanol y metanol por ser los solventes de mayor factibilidad económica.

Los solventes elegidos se simularon incluyendo monoetilenglicol, metoxipropanolacetato, dietilenglicol y glicerol que fueron los solventes que no presentaron camino de destilación, obteniéndose así los mejores resultados para la ciclohexanona ya que presento la más alta pureza de IPA 0.9987608 en moles y un mayor flujo de la misma 0.0396818 Kmol/h;

Los costos obtenidos por la regla de la palanca y con la simulación, coinciden en que la ciclohexanona es la segunda alternativa más factible económicamente con costos de 1769.91 COP y 5288.84 COP respectivamente.

Las pruebas experimentales se realizaron usando los equipos disponibles de la universidad EAFIT con los solventes elegidos, suministrados por la compañía Invesa S.A. En la torre de vidrio del laboratorio de operaciones unitarias se hicieron diversas destilaciones y procedimientos dependiendo del comportamiento del agente, para el metanol, Ciclohexanona y monoetilenglicol, que fueron los agentes elegidos según los resultados alcanzados en la simulación.

Las pruebas realizadas para la determinación de la pureza coinciden con los diferentes agentes de arrastre empleados, siendo la probeta uno del monoetilenglicol y el metanol y la nueve para la ciclohexanona las muestras de mayor porcentaje en moles de IPA.

Analizando todos los resultados obtenidos durante el proyecto, se eligió la Ciclohexanona como el mejor solvente por presentar menores costos (5288.84 y 1769.61 COP) y cumplir con el objetivo planteado en este trabajo de obtención de una composición de IPA mayor a la azeotrópica por simulación (99,87% en moles) y por experimentación (76.06 % en moles).

9.2. Recomendaciones

La Ciclohexanona fue el solvente elegido ya que cumplió con el objetivo general que se planteó para este proyecto, sin embargo, no es rentable económicamente puesto que los costos son mucho más altos a los que actualmente la compañía Invesa S.A invierte en el tratamiento de la mezcla. Además, las cantidades que se obtienen a un porcentaje alto de pureza son muy pequeñas comparadas con la cantidad alimentada y la pureza no logra el objetivo que se tiene planteado en Invesa S.A correspondiente a 99% en moles. Por lo anterior, no se recomienda a la empresa Invesa S.A implementar este procedimiento

Aunque cabe resaltar que con acciones de mejora del proceso se podrían obtener resultados favorables y cercanos al objetivo, tales como adecuar el equipo para evitar posibles fugas, establecer controles de temperatura y flujos, implementar otros métodos de análisis de pureza de IPA, emplear otro tipo de equipo como una torre de destilación a nivel industrial donde se cuente con más de 10 platos, realizar destilación batch en el mismo equipo empleado en la experimentación con reflujo, ya que, puede aumentar las composiciones de IPA obtenidas en este proyecto, entre otras acciones.

Con el fin de verificar el porcentaje de IPA obtenido en las pruebas experimentales es recomendable implementar un método de mayor sensibilidad, como la cromatografía gaseosa que determina la presencia de IPA en otras sustancias.

Adicionalmente, se recomienda realizar este ensayo con Isobutanol, ya que es un agente que presentó un costo total pequeño comparado con otros agentes y tiene el mismo comportamiento de la Ciclohexanona, por lo tanto, se podrían llegar a

obtener buenos resultados. También, elegir otro camino de destilación al seleccionado en este proyecto para los agentes factibles termodinámicamente, alcanzaría resultados diferentes y valores de purezas para conseguir el objetivo.

Implementar otros métodos de separación de azeótropos, por ejemplo, separación con membranas, que es de bajo costo y según reportes literarios arroja buenos resultados. Inclusive, validar los datos de la simulación empleando otro simulador comercial proporcionaría bases para posible implementación de otros métodos.

Continuar en la investigación de esta separación con otros estudiantes, implementando métodos y usando otros equipos de la universidad EAFIT, por ejemplo, el equipo de destilación de acero inoxidable donde se puede realizar ensayos experimentales en destilación continua.

Anexo A

A continuación se muestran los solventes dados por la empresa Invesa S.A

Metanol	Butilacetato	Varsol
Etanol	Glicerol	Thinner
Butanol (n-Butanol e Isobutanol)	O-Xileno	Metil Etil Cetona
Metoxipropanolacetato	Tolueno	Butil glicol éter
Etilacetato	Alisol	Tributil Citrato
Monoetilenglicol	Dietilenglicol	Ciclohexanona